

# **Интерпретация спектров ЯМР на ядрах $^1\text{H}$**

*Сборник упражнений*

Санкт-Петербург

2015 г.

Составители:

к.ф.-м.н. П. М. Толстой

Рецензенты:

проф., д.х.н. М.А. Кузнецов (СПбГУ), д.х.н. С.В. Макаренко (РГПУ им. А.И. Герцена)

Утверждено Ученым Советом Института химии СПбГУ в качестве учебного пособия  
для студентов 3-го и 4-го курса Института химии СПбГУ.

## Введение

Настоящий сборник упражнений является учебным пособием к курсу «Магнитный резонанс» и предназначен студентов, начинающих знакомство с ЯМР как с методом определения структуры органических соединений. Материалом для упражнений служат оригинальные экспериментальные данные, полученные на спектрометре ЯМР с рабочей частотой 60 МГц для ядер  $^1\text{H}$ . Для спектроскопии ЯМР данная частота не является современной, ее можно даже назвать архаичной (современные спектрометры высокого разрешения работают на частотах 400-1000 МГц). Однако, существенным преимуществом, определившим выбор частоты, является наглядность: в этом случае константы спин-спинового взаимодействия отчетливее видны на спектрах (реже требуется делать «врезки» для отдельных линий, чтобы показать расщепление), ярче проявляются эффекты взаимодействия мультиплетов («эффект крыши»), студенты лучше усваивают связь шкал химических сдвигов и частот. Знания и навыки, полученные при решении предложенных в сборнике упражнений, с легкостью переносятся на спектры, зарегистрированные на других приборах.

В сборнике предложена методическая схема, позволяющая студентам системно подойти к решению задач на интерпретацию спектров и дающая возможность преподавателю оценить ход решения при проверке. Сборник содержит 55 упражнений (для Упражнения 1 есть подробное решение), предназначенных как для рассмотрения на семинарских занятиях, так и для самостоятельной работы, а также справочные таблицы и ответы к половине упражнений. Упражнения в целом упорядочены по сложности и, там где это было уместно, по однотипности.

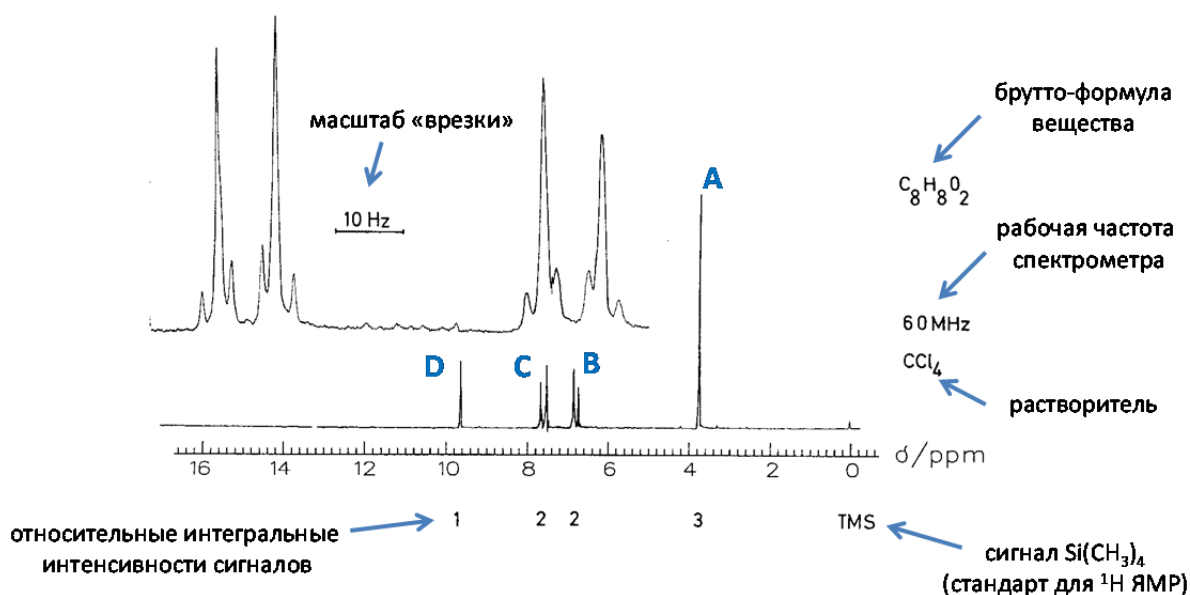
## Оглавление

Методическая схема решения задач .....	3
Упражнения на интерпретацию $^1\text{H}$ спектров ЯМР .....	5
Справочные таблицы .....	32
Ответы .....	45

## Методическая схема решения задач

При решении задач предлагается использовать подход, рассмотренный ниже.

**Упражнение 1.** Определите строение соединения по его спектру  $^1\text{H}$  ЯМР.



1. Проиндексируйте наблюдаемые на спектре сигналы (A, B, C, D и т.д.)  
В примере 4 сигнала.
2. Для каждого сигнала определите хим. сдвиг ( $\delta$ ), относительную интенсивность ( $I$ ), мультиплетность и величину расщепления ( $J$ ; s – синглет, d – дублет и т.д.).  
В примере хим. сдвиги достаточно определить с точностью до долей м.д., интенсивности уже приведены на рисунке, а величину константы спин-спинового расщепления можно узнать при помощи шкалы в Гц на врезке.
3. Для каждого сигнала предположите (с использованием справочных таблиц) функциональную группу, могущую давать это сигнал.  
В примере имеем: химсдвиг 3.8 м.д. характерен для  $\text{CH}_3\text{-O-}$  группы (интеграл равный 3-м указывает именно на метил), присоединенной к ароматическому кольцу; химсдвиги пары сигналов с интегралом 2 на 6.8 и 7.6 м.д. указывают на ароматическую систему, а форма сигналов – на пара-замещенный бензол (система AA'BB'; формальное расщепление пары наиболее интенсивных линий около 9 Гц); синглет на 9.6 м.д. типичен для альдегидной группы.
4. Внесите информацию в первые 5 столбцов таблицы следующего вида:

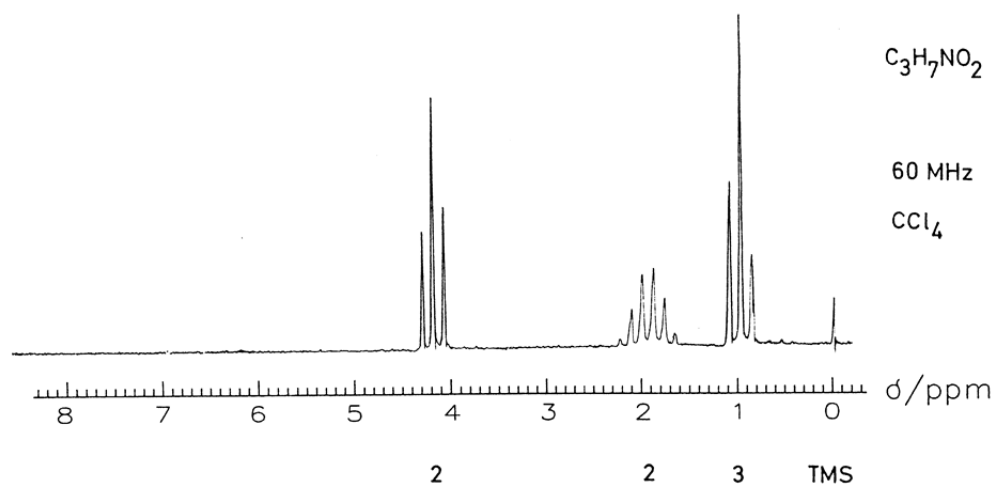
№	$\delta$ , м.д.	$I$ , отн.ед.	$J$ , Гц	Фрагмент	Гипотезы	Отнесение
A	3.8	3	s			4
B	6.8	2	AA'BB', 9 Гц			3
C	7.6	2	AA'BB', 9 Гц			2
D	9.6	1	s			1
$\Phi H = 5$						

5. Часто бывает полезно записать также рассчитанное значение формальной неопределенности (ФН), исходя из брутто-формулы и используя выражение  $\Phi H = 0.5 (2 + 4Z_6 + 3Z_5 + 2Z_4 + Z_3 - Z_1)$ , где  $Z_n$  – число элементов с валентностью  $n$  ( $n = 4$  для С,  $n = 3$  для N и  $n = 1$  для H, F, Cl, Br и т.д.).  
*В примере получаем  $\Phi H = 0.5 (2 + 2 \cdot 8 - 8) = 5$ .*
6. Из предположенных функциональных групп «соберите» молекулу, которая по вашей гипотезе отвечает спектру. Проверьте, что гипотеза соответствует брутто-формуле и рассчитанному значению ФН. Обратите внимание, что часто можно составить несколько изомеров из одних и тех же фрагментов; в этом случае запишите все изомеры и приведите аргументы, почему некоторые из них не подходят.  
*В примере возможен только один изомер – пара-метоксибензальдегид (т.н. анисовый альдегид). Структура согласуется с брутто-формулой и  $R+D = 5$  (одна связь  $C=O$ , три кратные связи в кольце и само кольцо).*
7. Пронумеруйте группы, содержащие протоны в предложенной молекуле. В последнем столбце запишите, как нумерованные группы соответствуют сигналам А, В, С и т.д.  
*В примере возможны два отнесения ( $B=2, C=3$  или  $B=3, C=2$ ). Правильный вариант можно определить, если воспользоваться таблицей инкрементов химических сдвигов для замещенных бензолов (для дважды и более замещенных бензолов значения в таблице могут быть не совсем точными):  
 орто-протоны (относительно  $CHO$ ):  $\delta = 7.26 + 0.56 - 0.09 = 7.73$  м.д.  
 мета-протоны (относительно  $CHO$ ):  $\delta = 7.26 + 0.22 - 0.48 = 7.00$  м.д.*

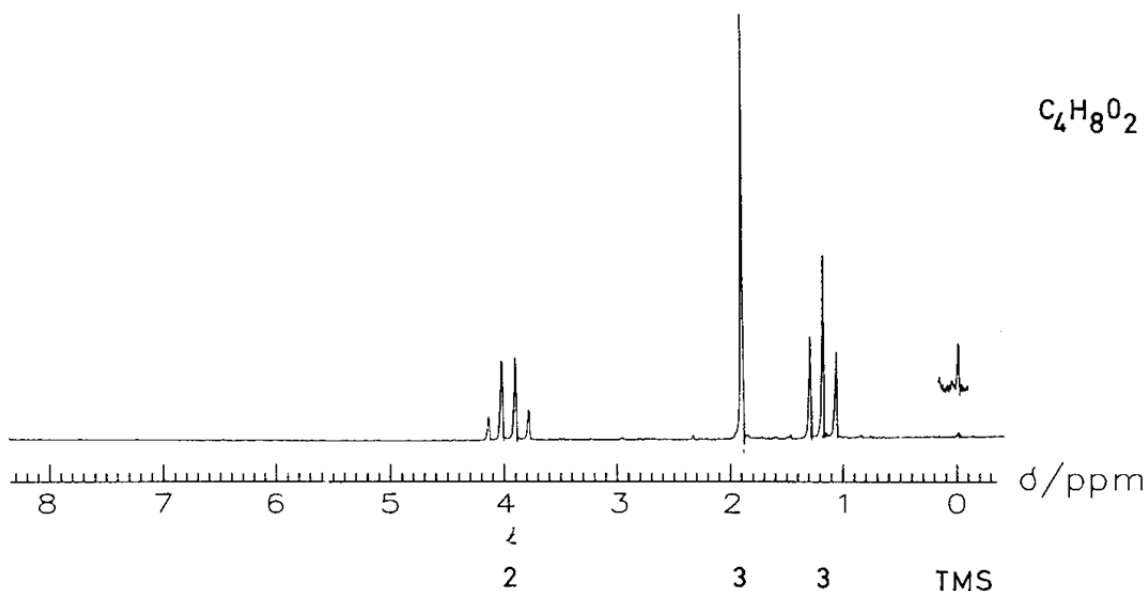
Методическая схема не является обязательной и при наличии навыка достаточно ограничиться указанием фрагментов, гипотез и финального отнесения сигналов на спектре.

**Формулировка задания для всех упражнений:** определите строение молекулы соединения по заданной брутто-формуле и спектру  $^1\text{H}$  ЯМР. Спектры сняты на приборе с рабочей частотой 60 МГц в растворе в  $\text{CCl}_4$  (если не оговорено особо).

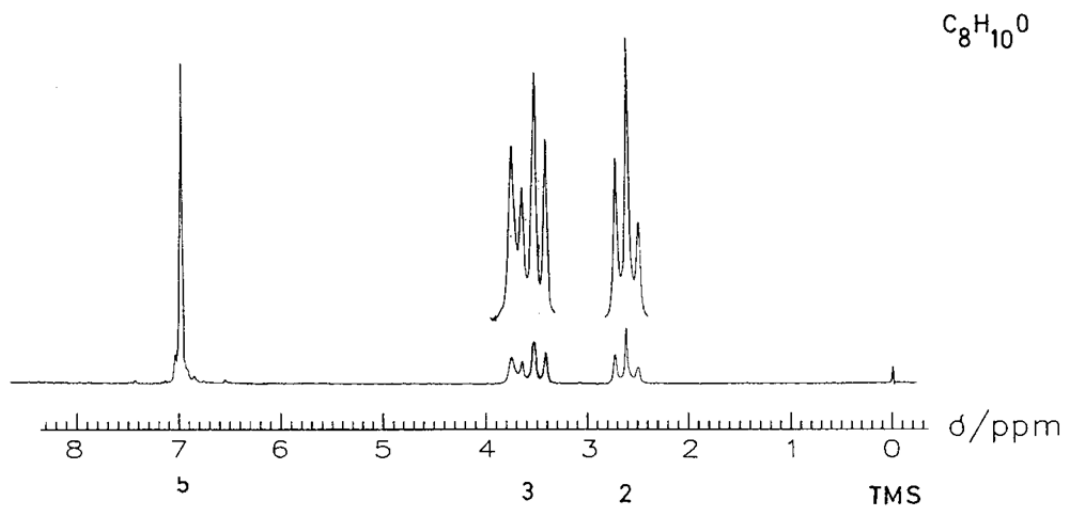
**Упражнение 2.**



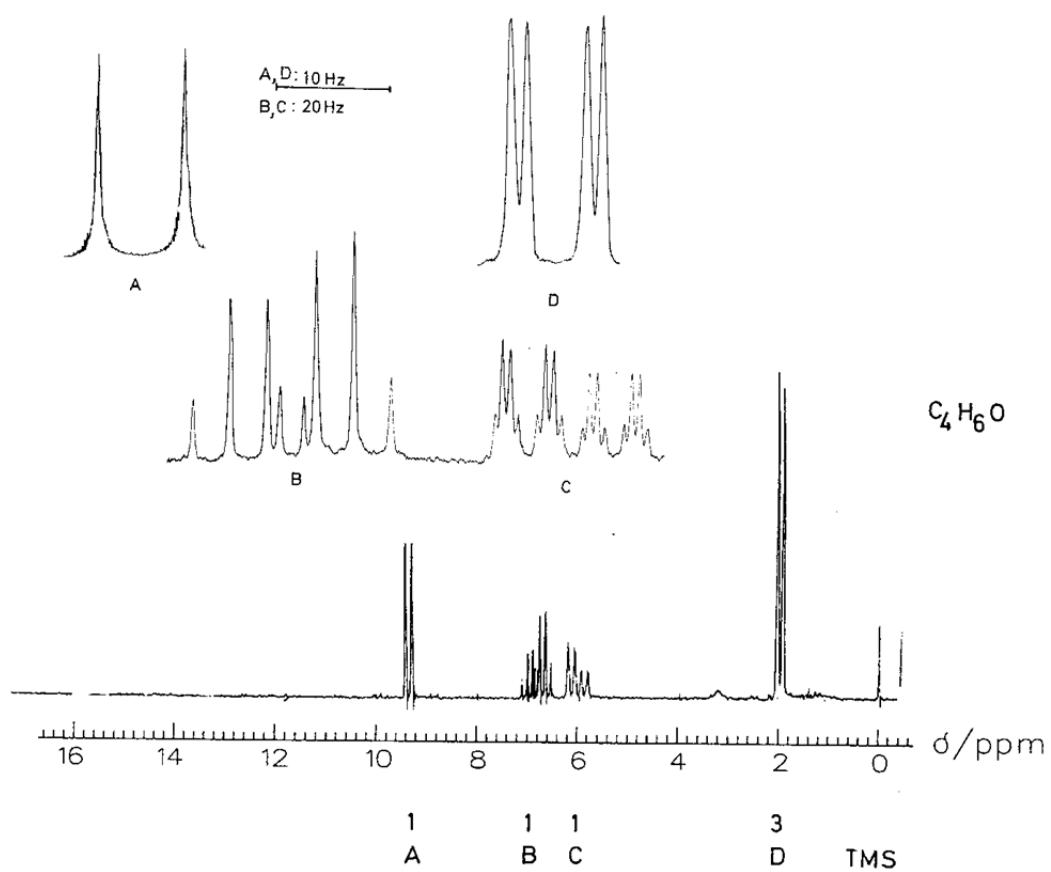
**Упражнение 3.**



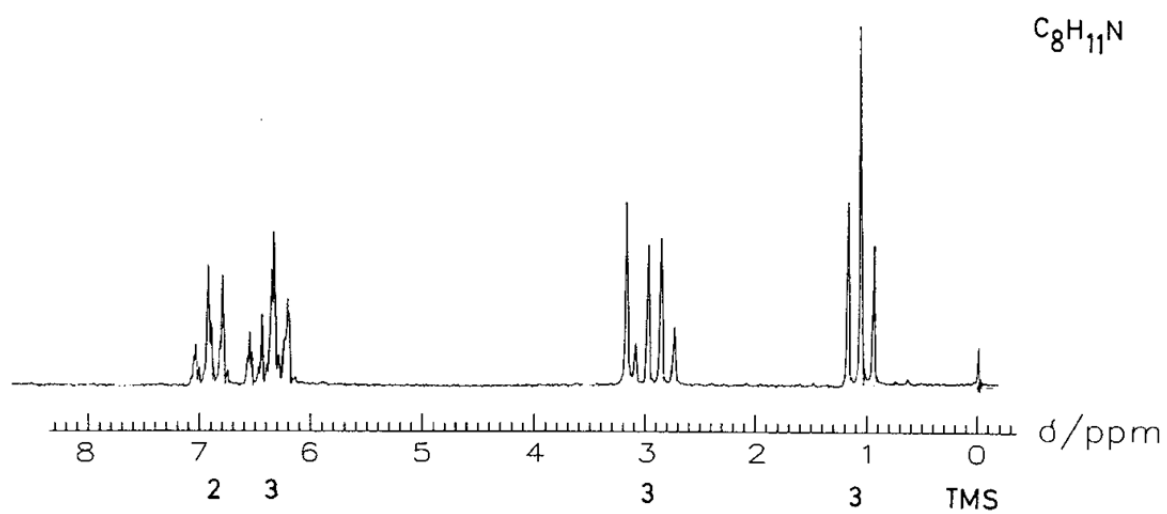
# Упражнение 4.



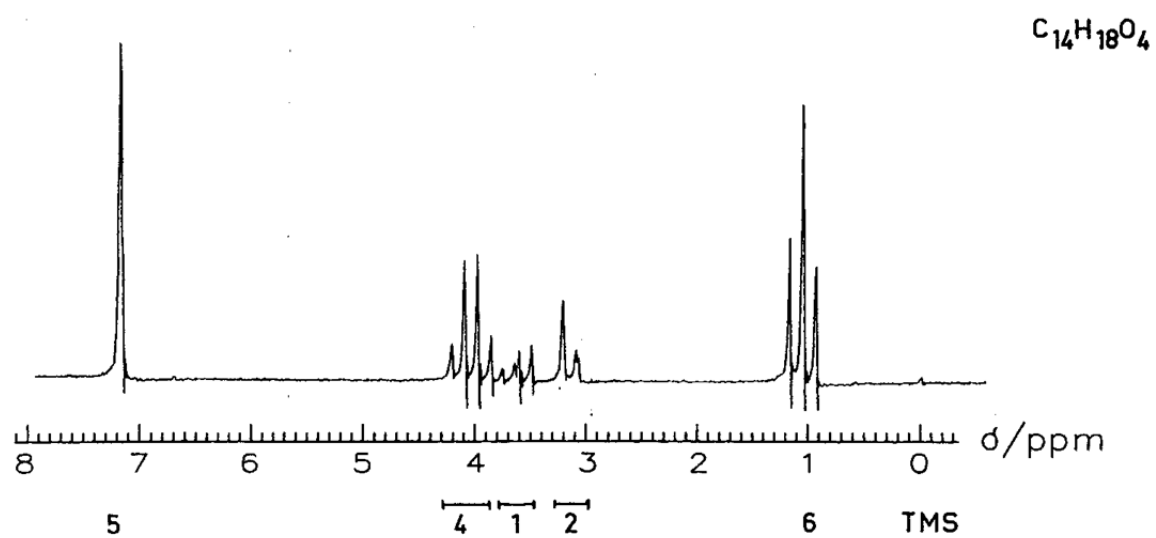
# Упражнение 5.



Упражнение 6.

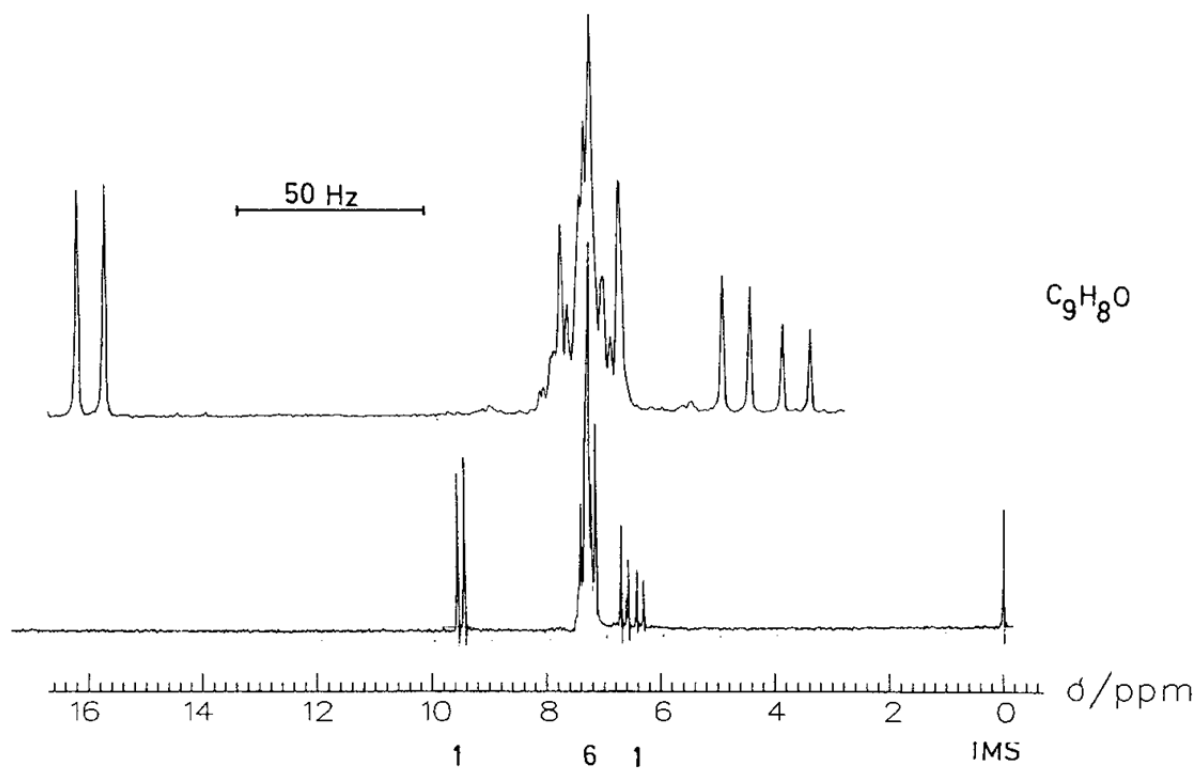


Упражнение 7.

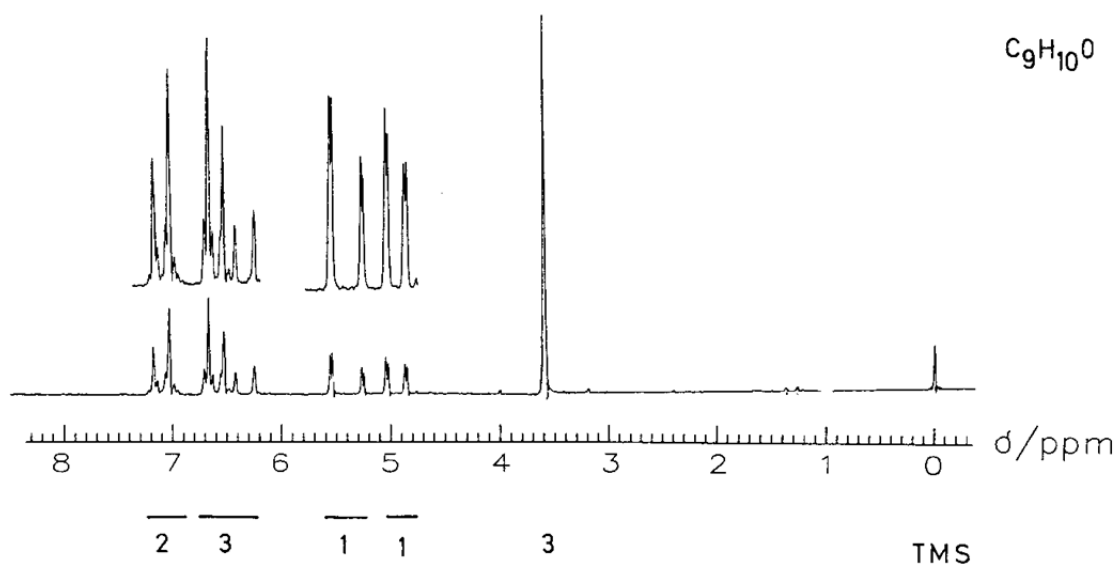




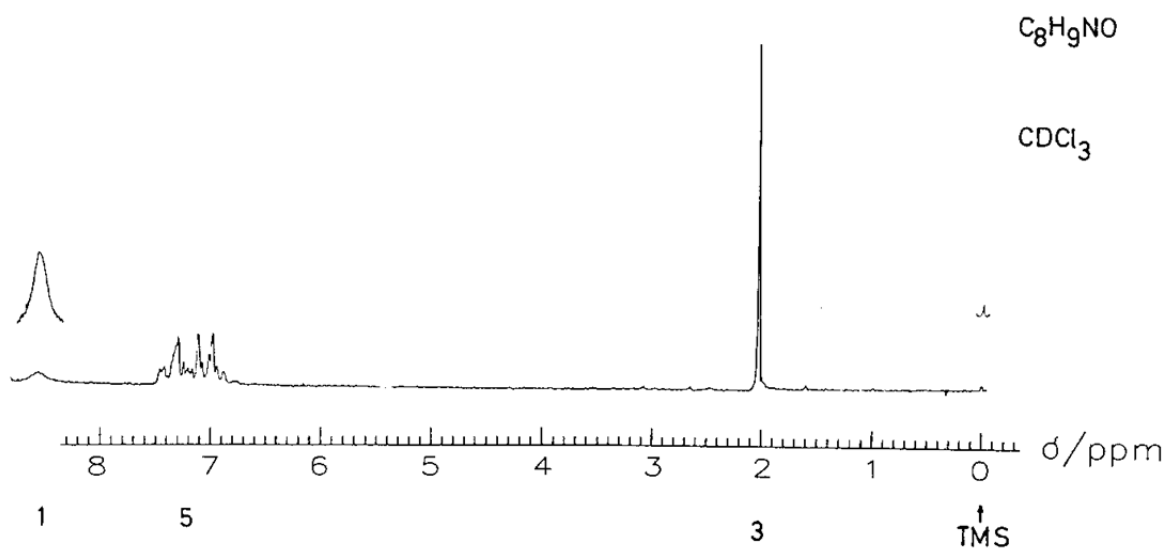
Упражнение 8.



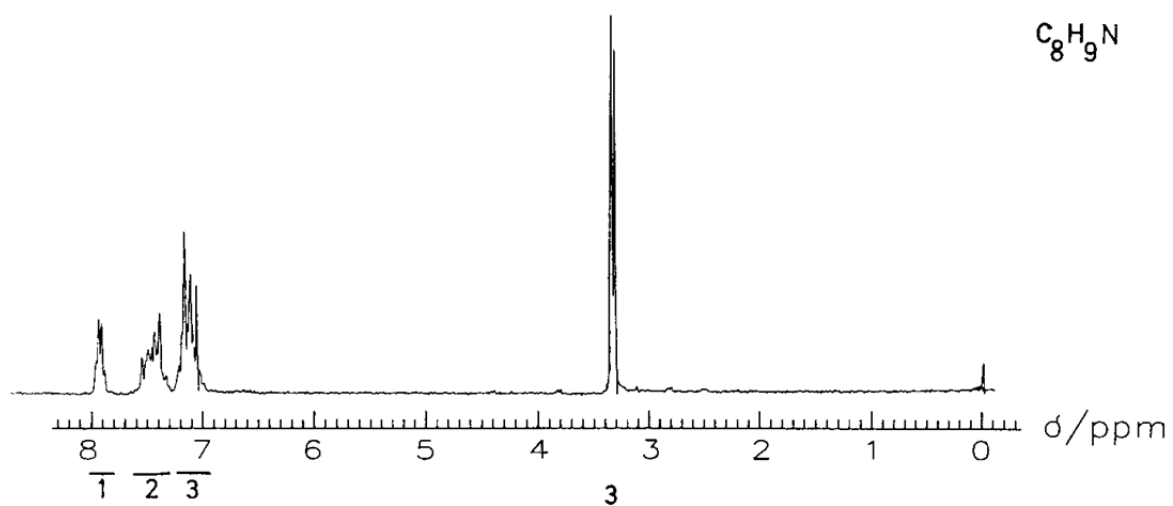
Упражнение 9.



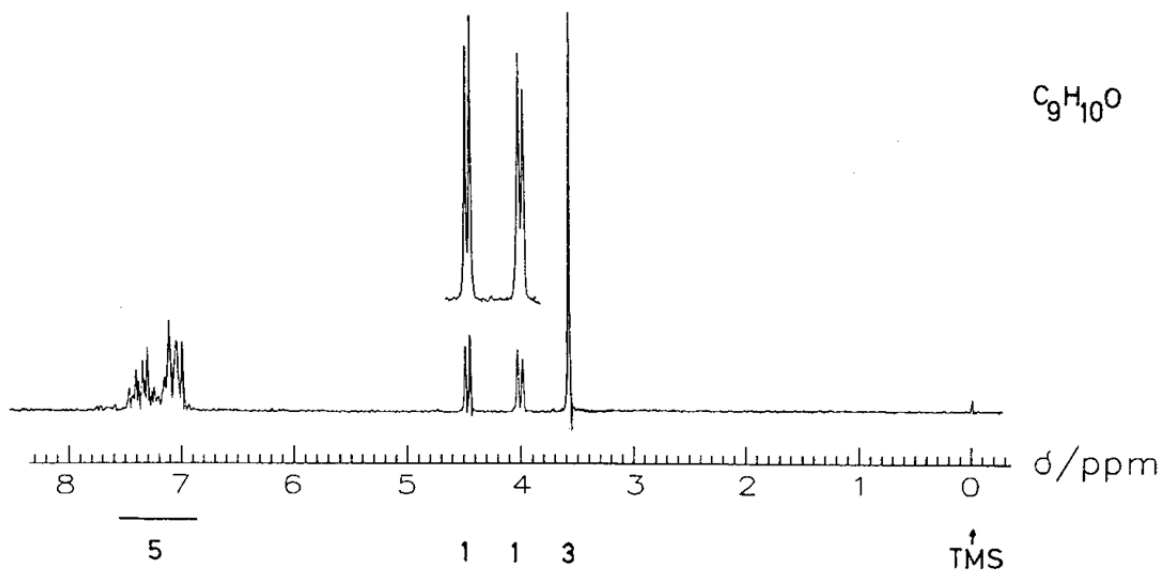
Упражнение 10.



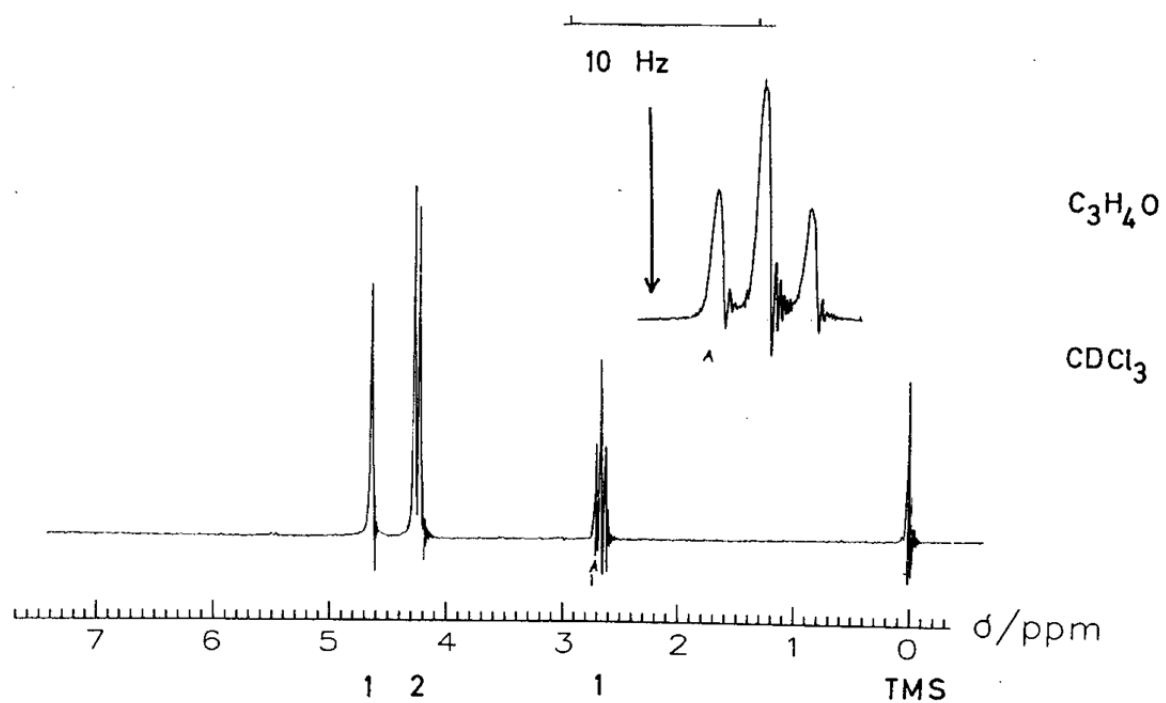
Упражнение 11.



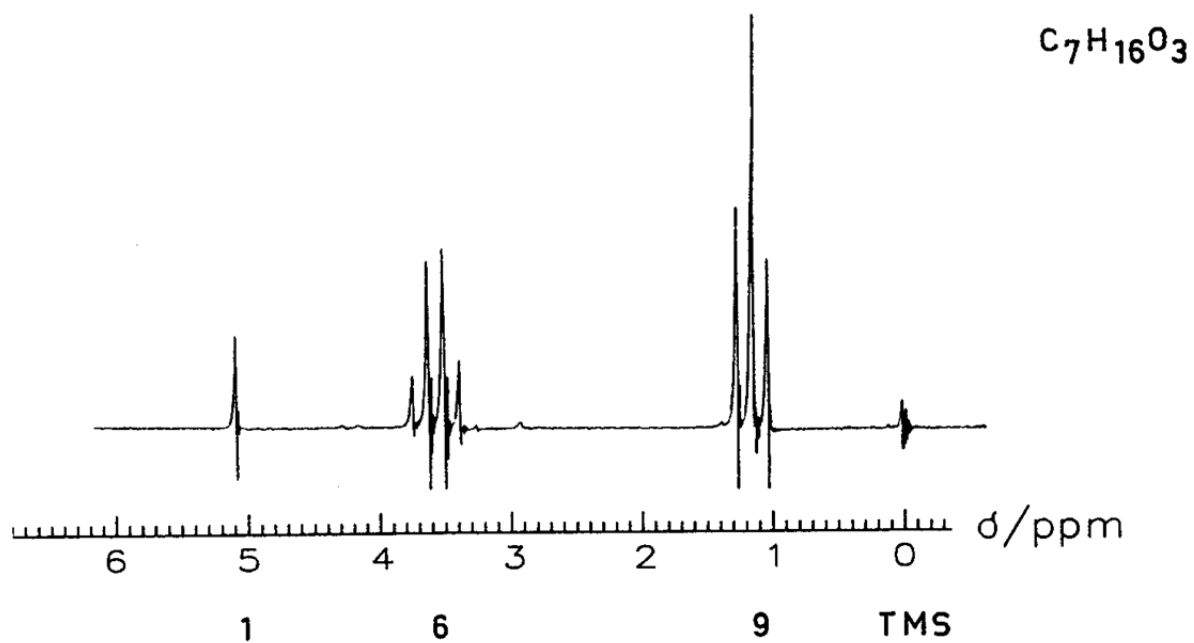
Упражнение 12.



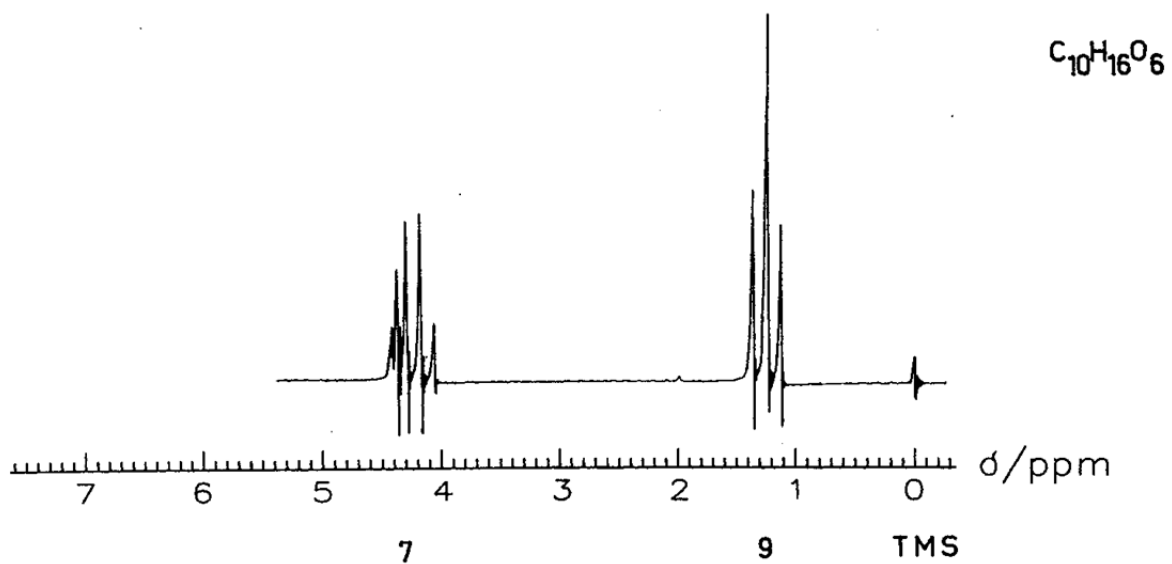
Упражнение 13.



Упражнение 14.

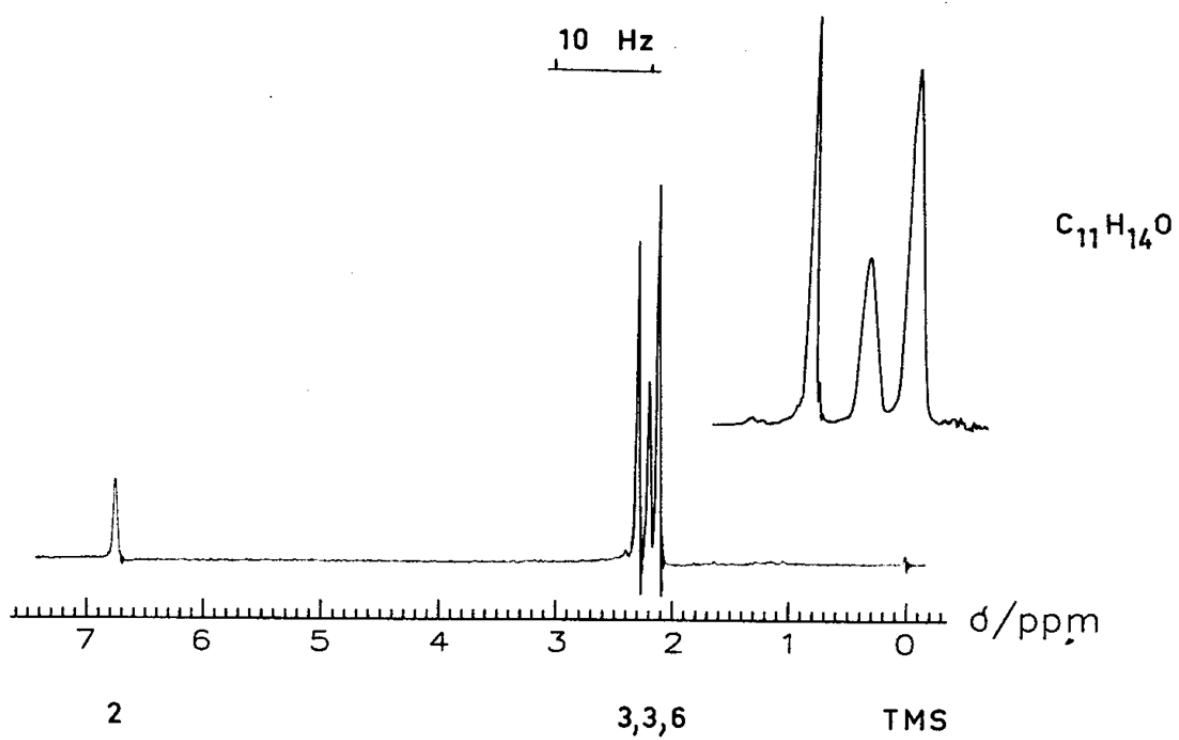


Упражнение 15.

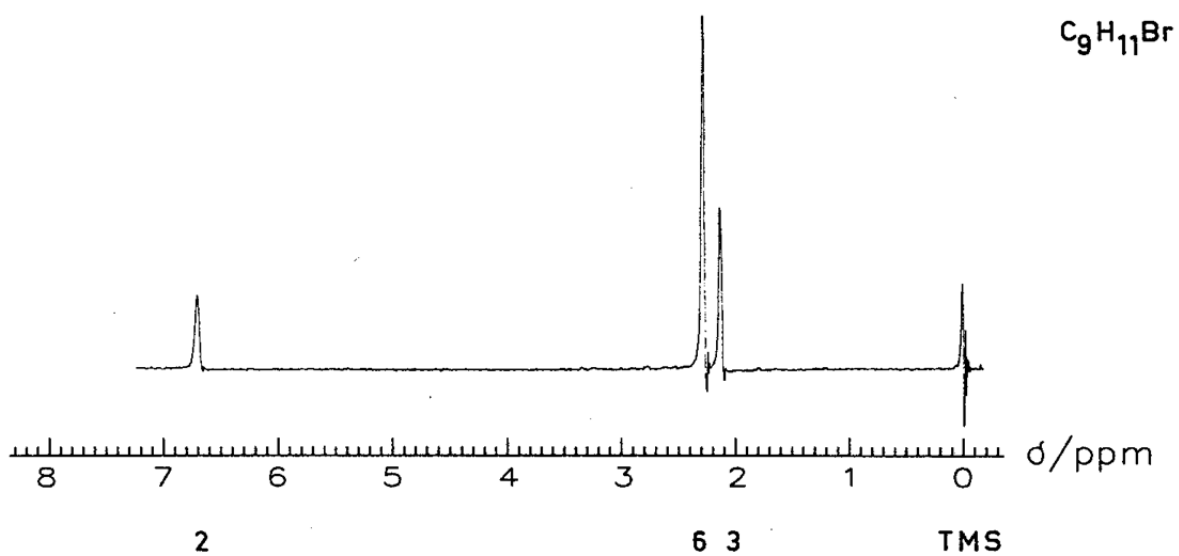




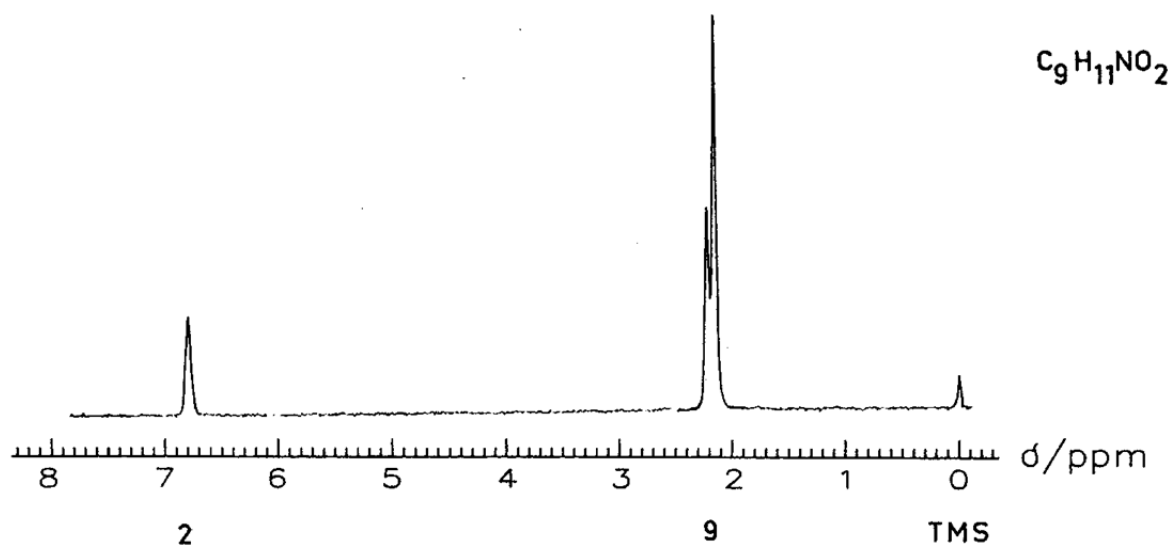
Упражнение 18.



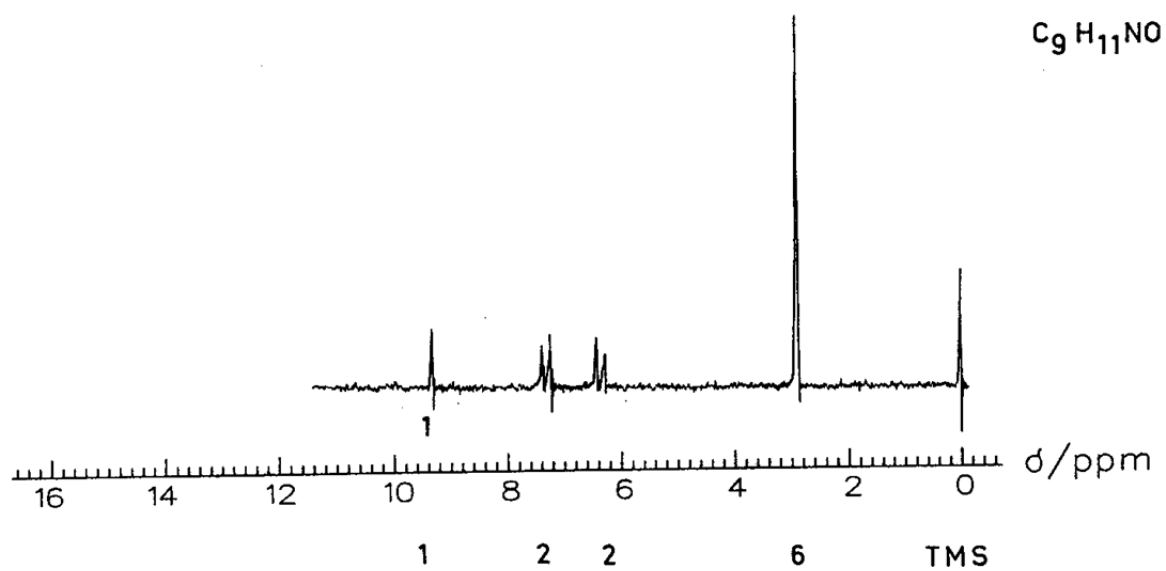
Упражнение 19.



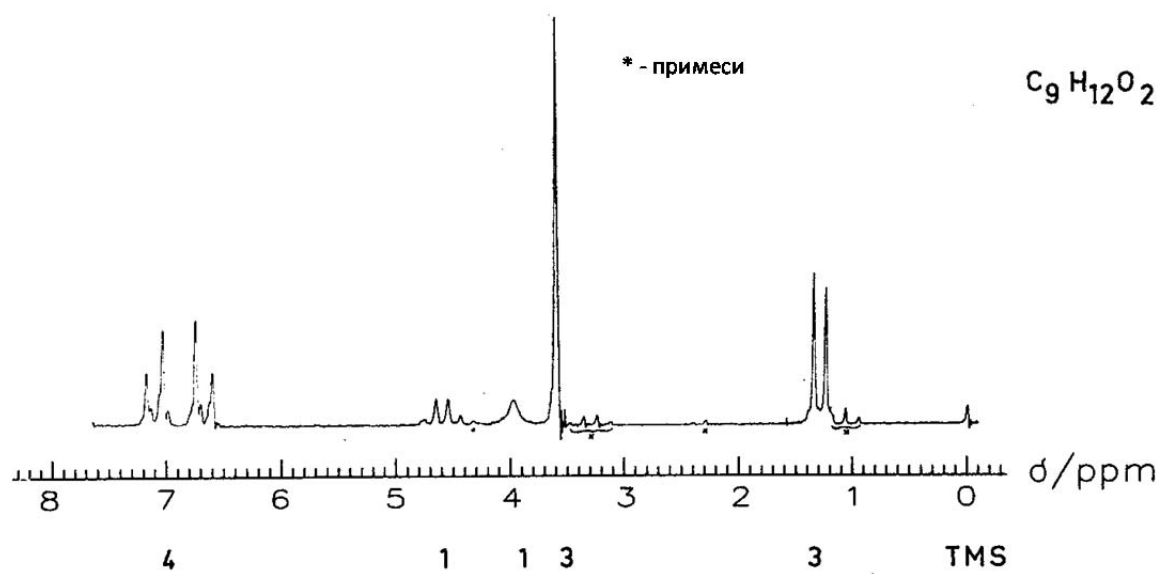
Упражнение 20.



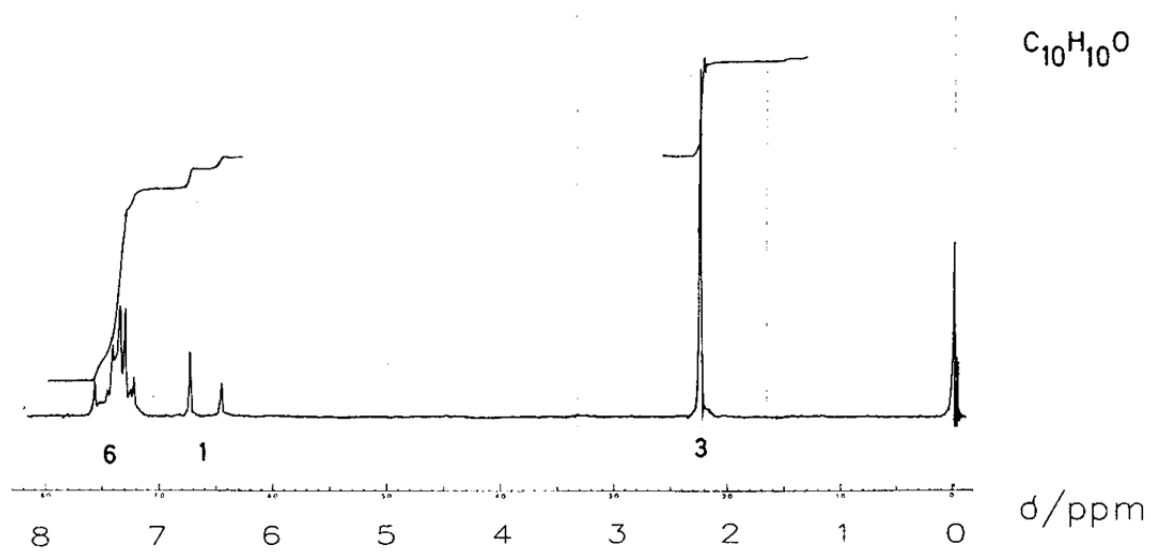
Упражнение 21.



Упражнение 22.

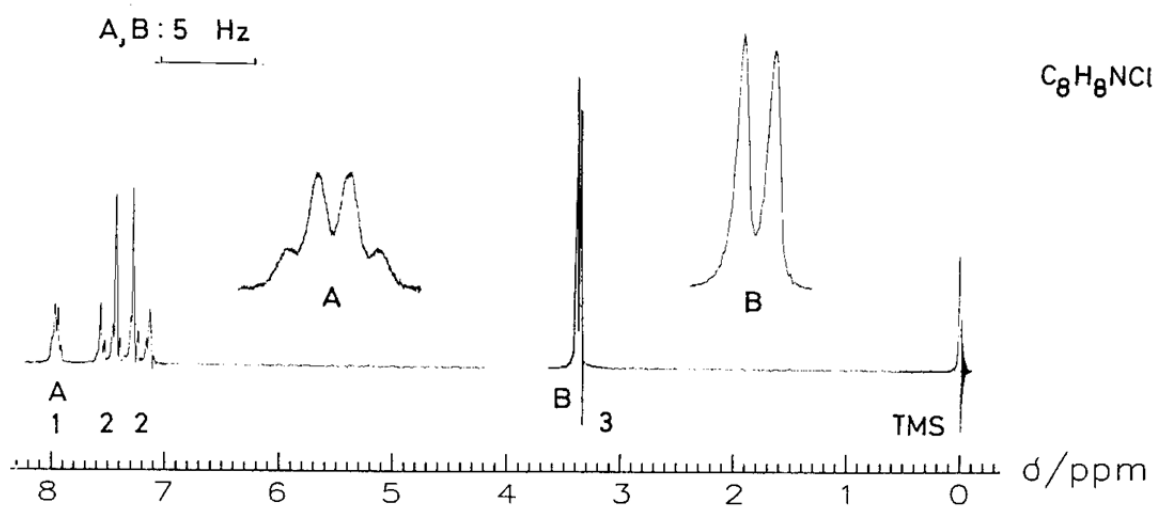


Упражнение 23.

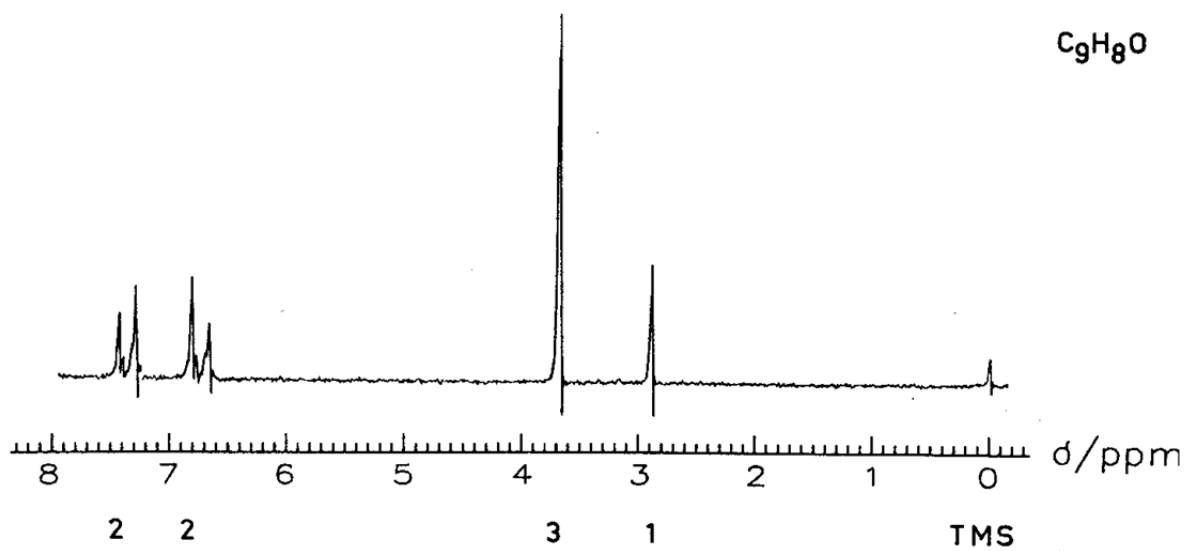




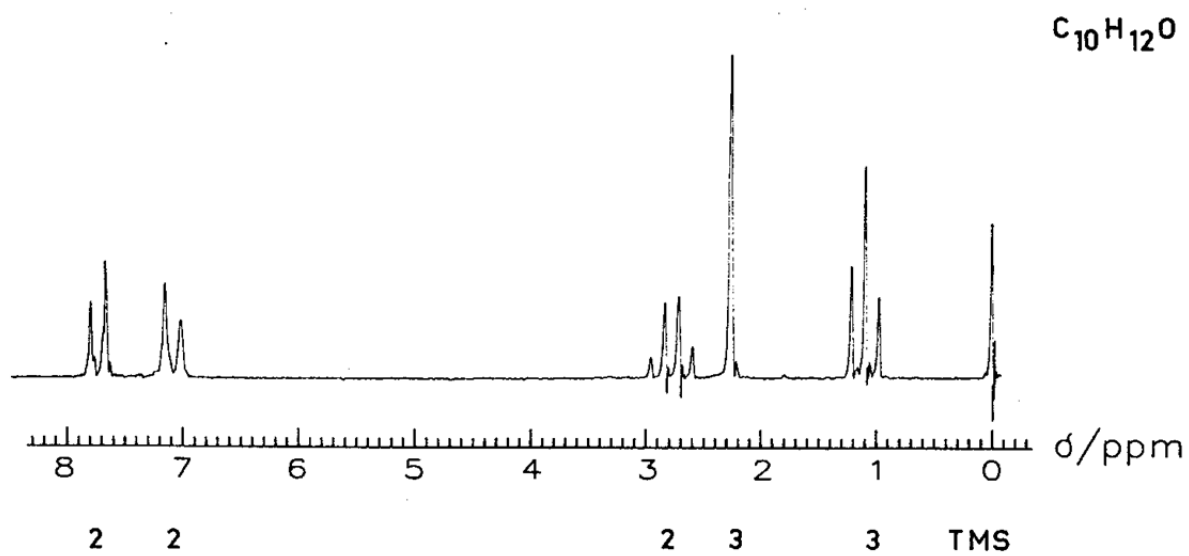
Упражнение 24.



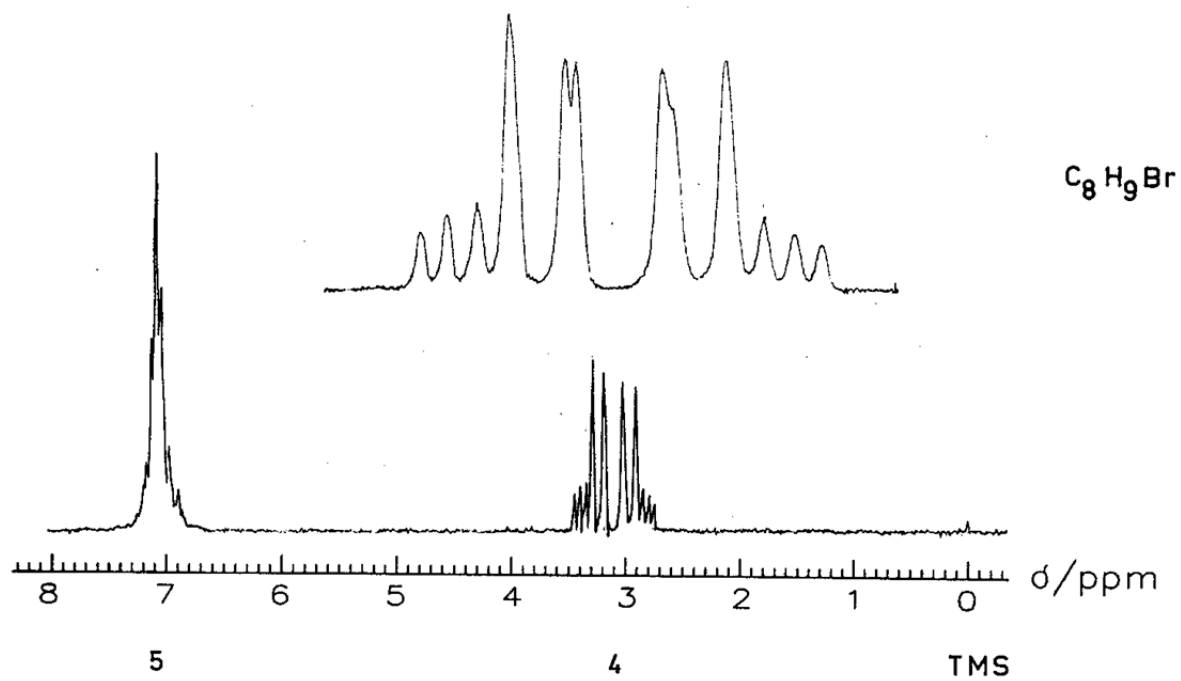
Упражнение 25.



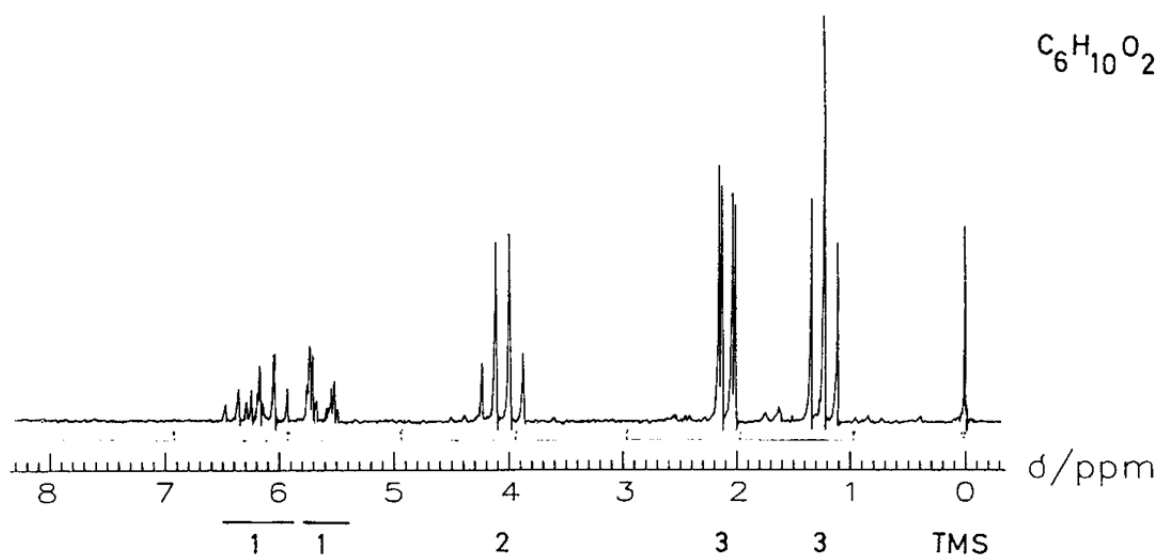
Упражнение 26.



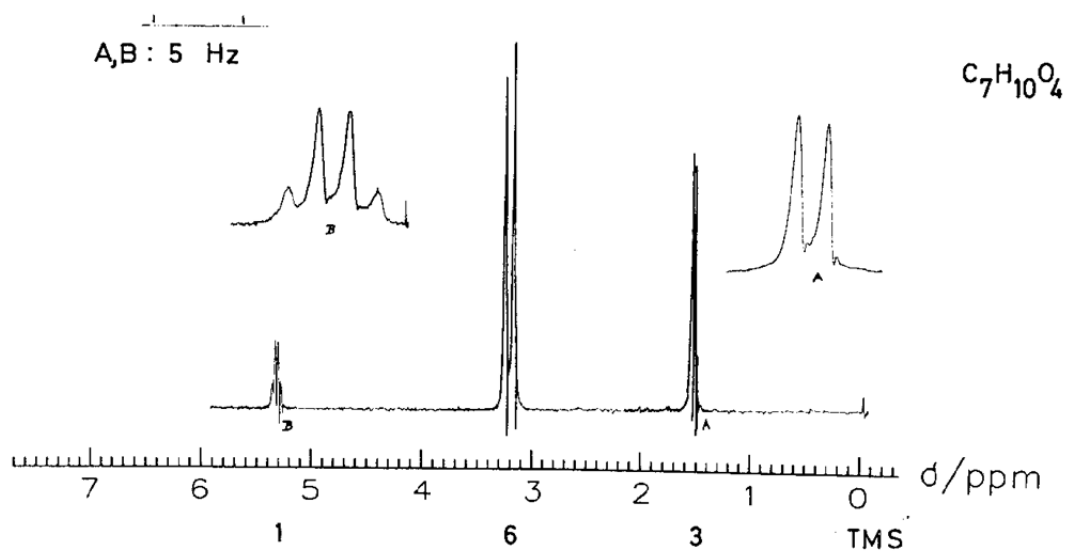
Упражнение 27.



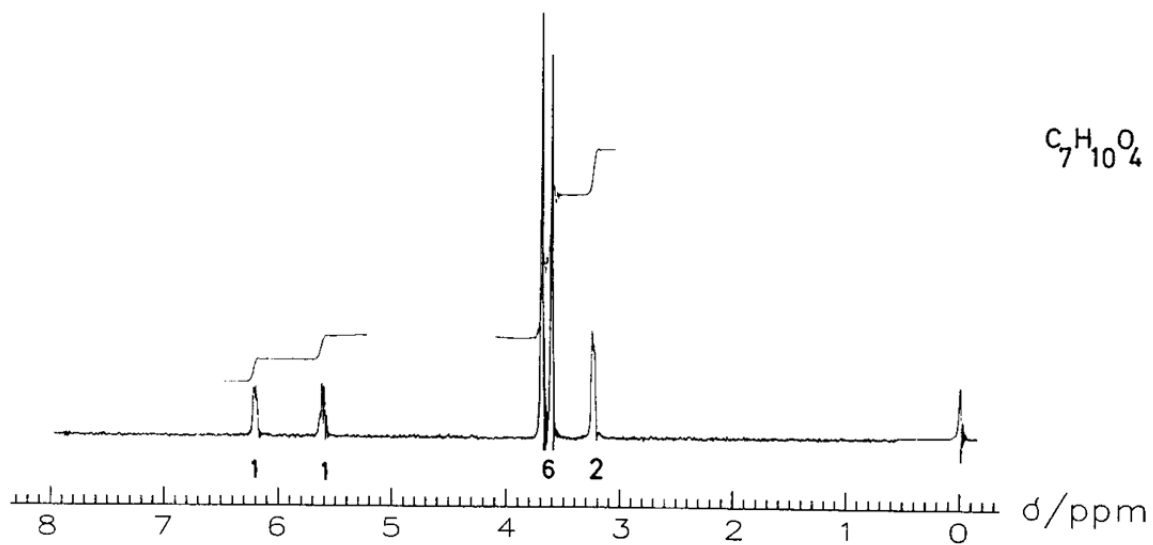
Упражнение 28.



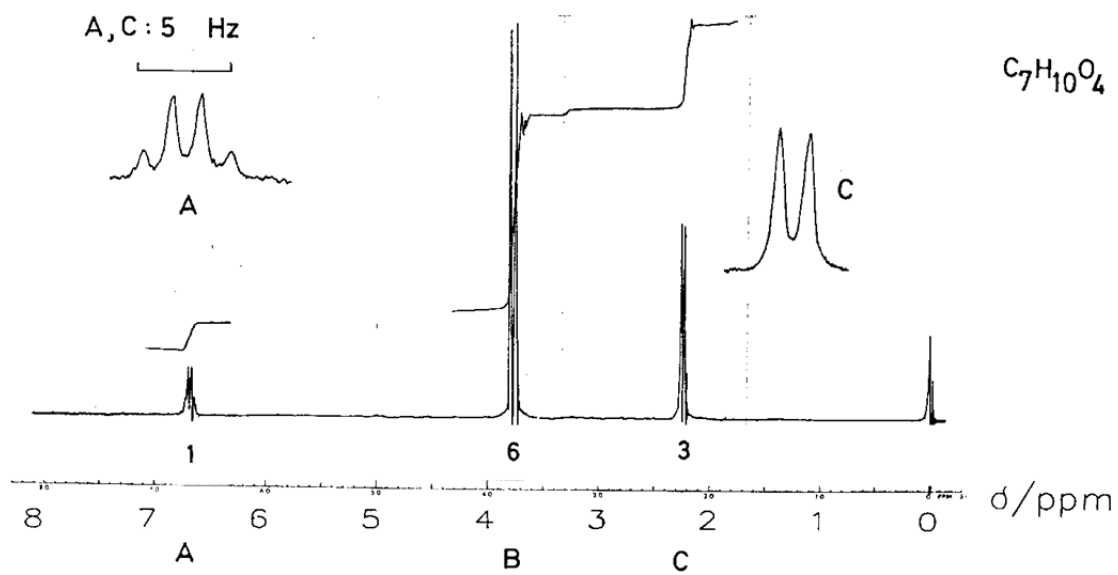
Упражнение 29.



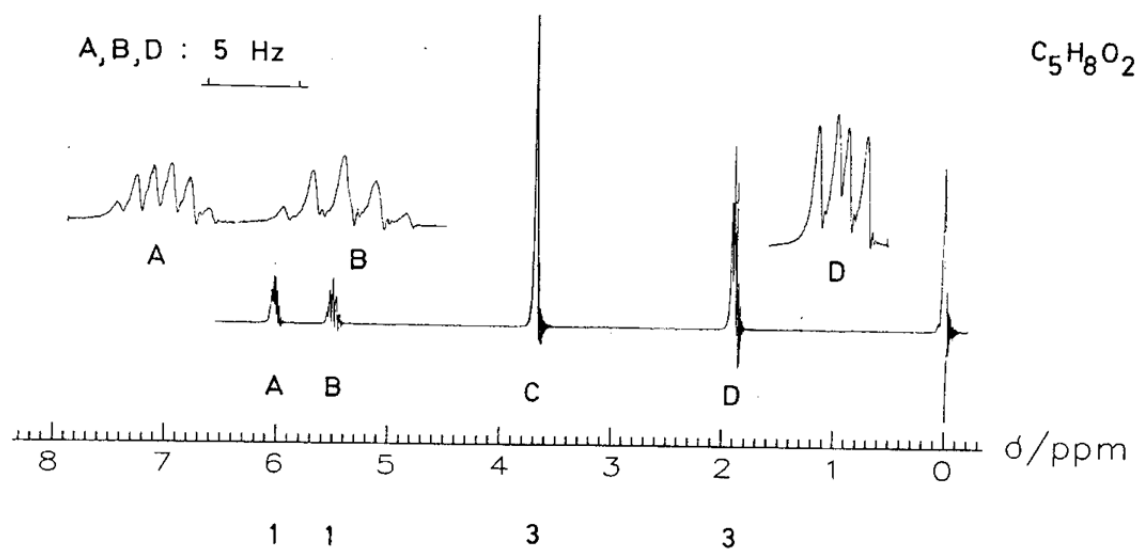
Упражнение 30.



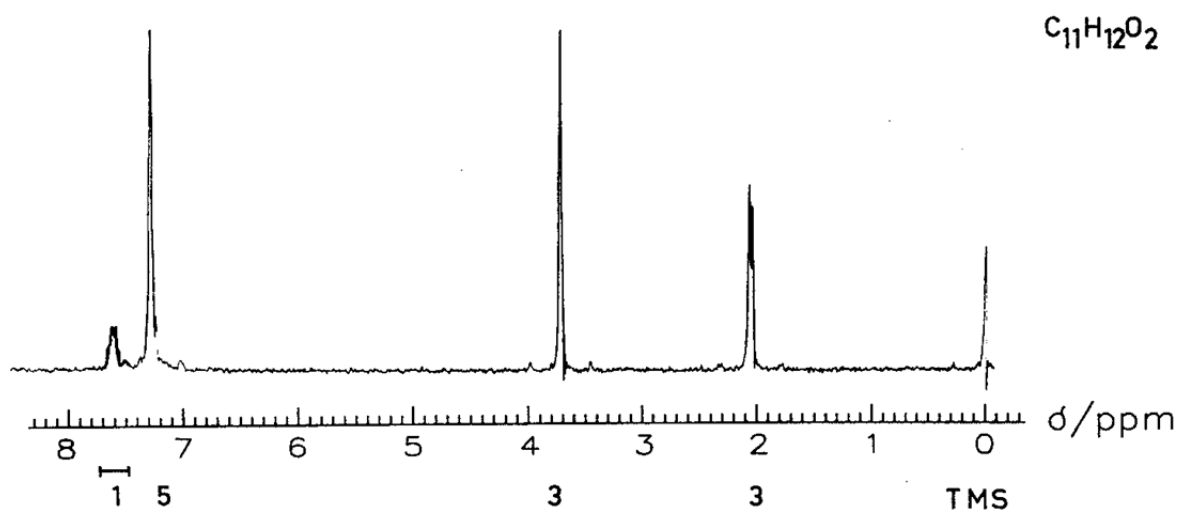
Упражнение 31.



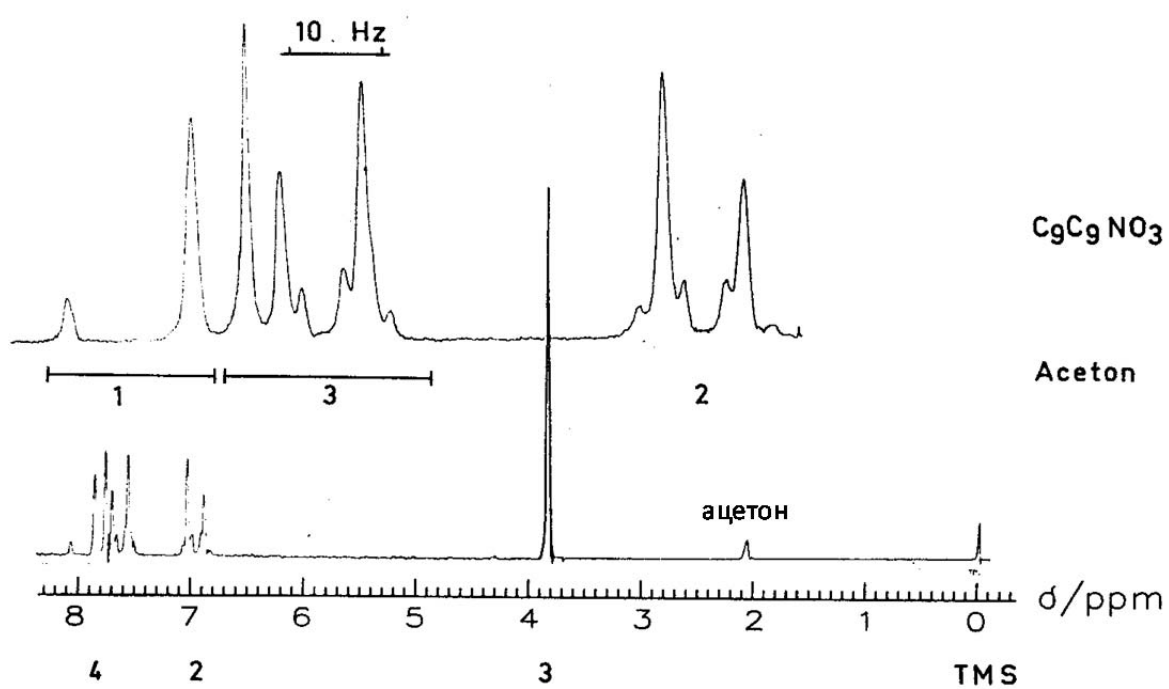
Упражнение 32.



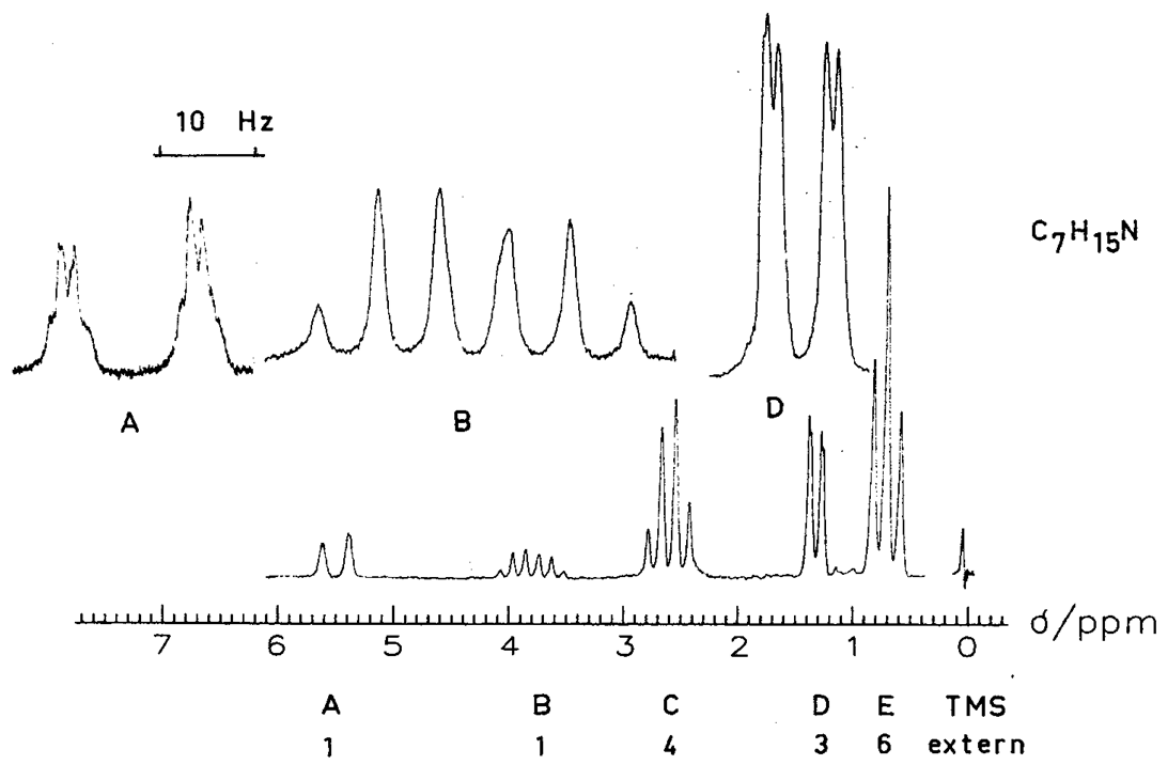
Упражнение 33.



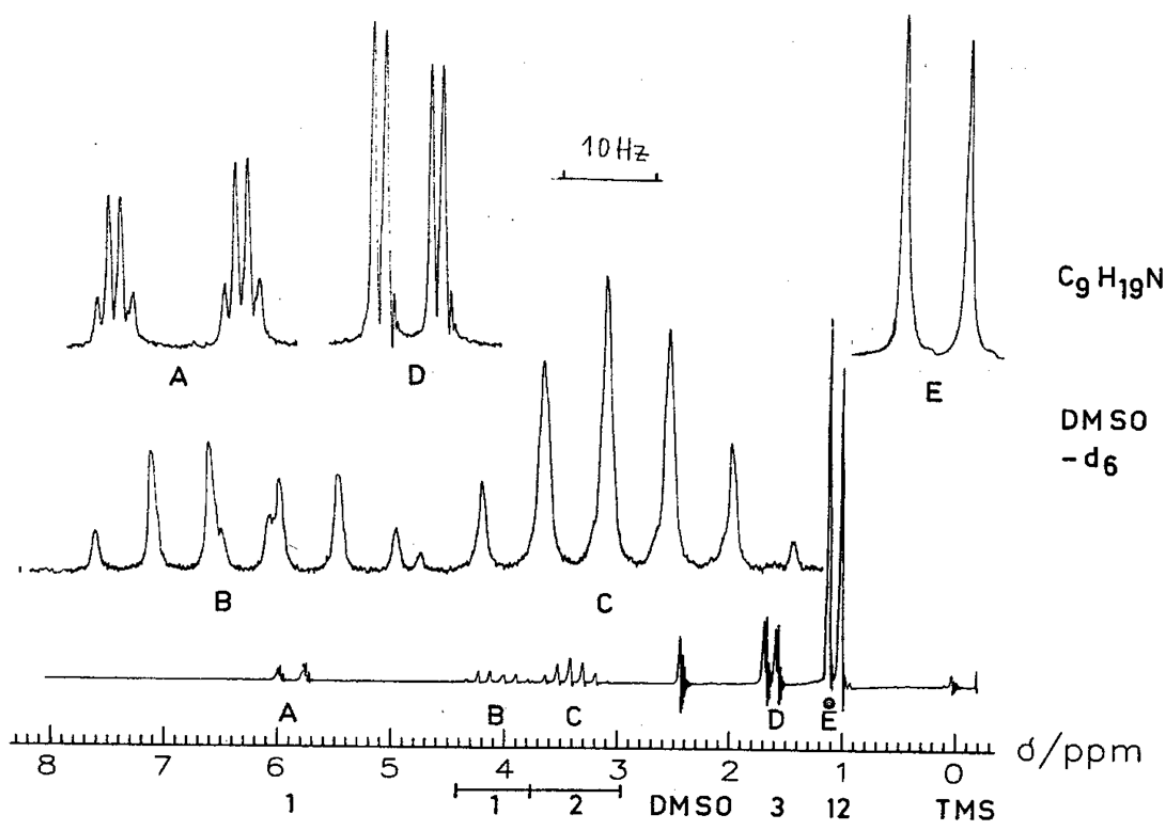
Упражнение 34.



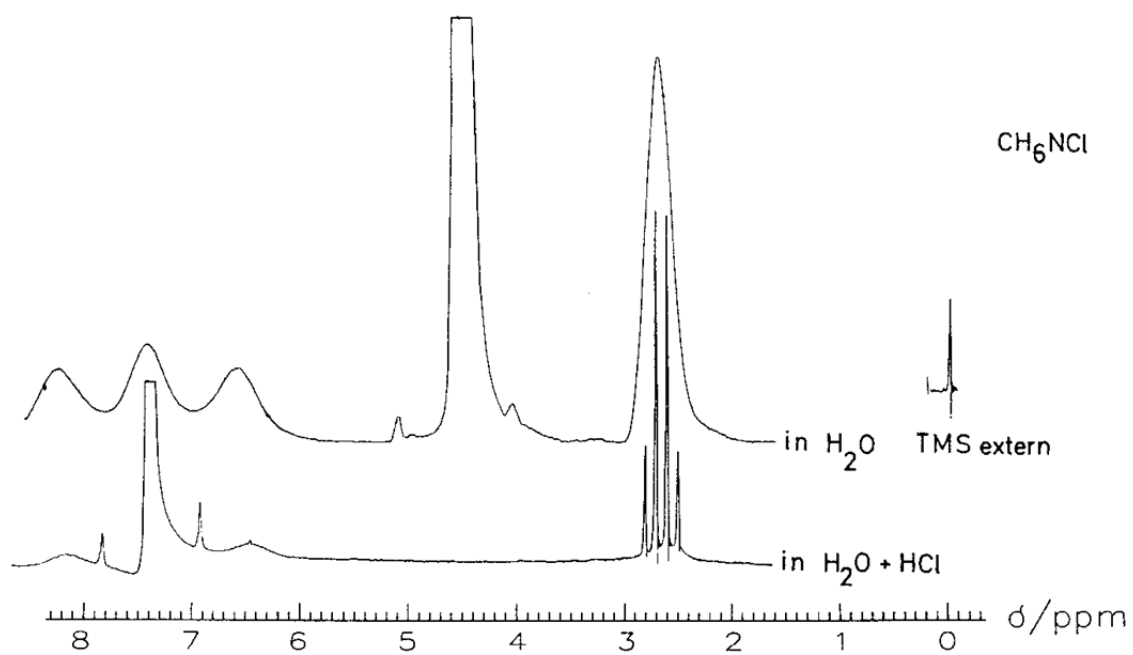
Упражнение 35.



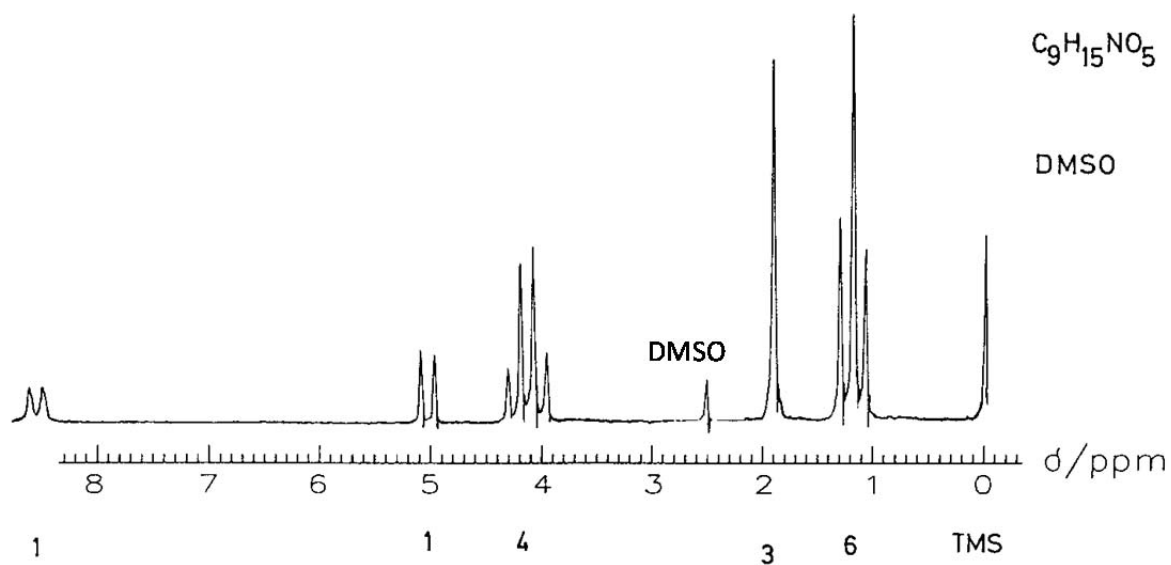
Упражнение 36.



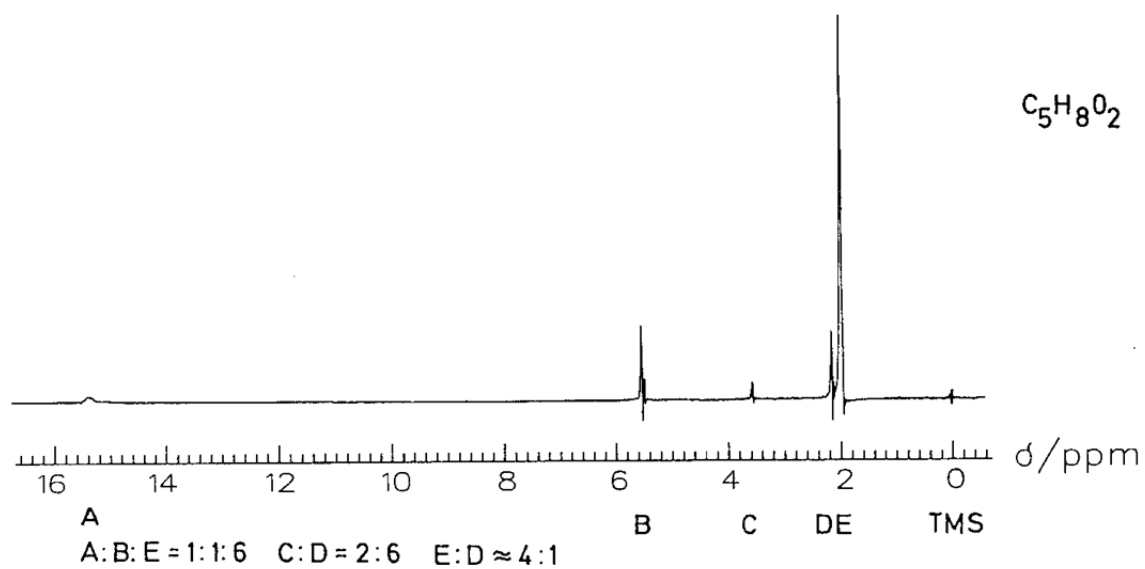
Упражнение 37.



Упражнение 38.

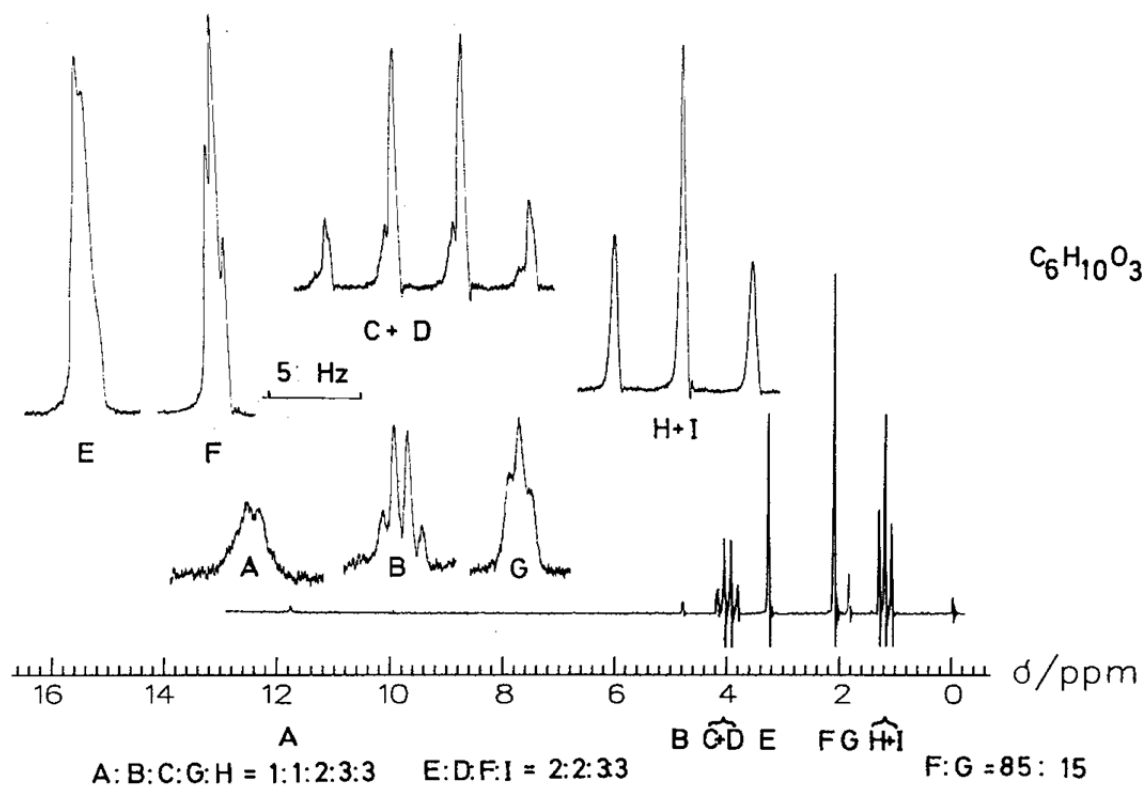


Упражнение 39.

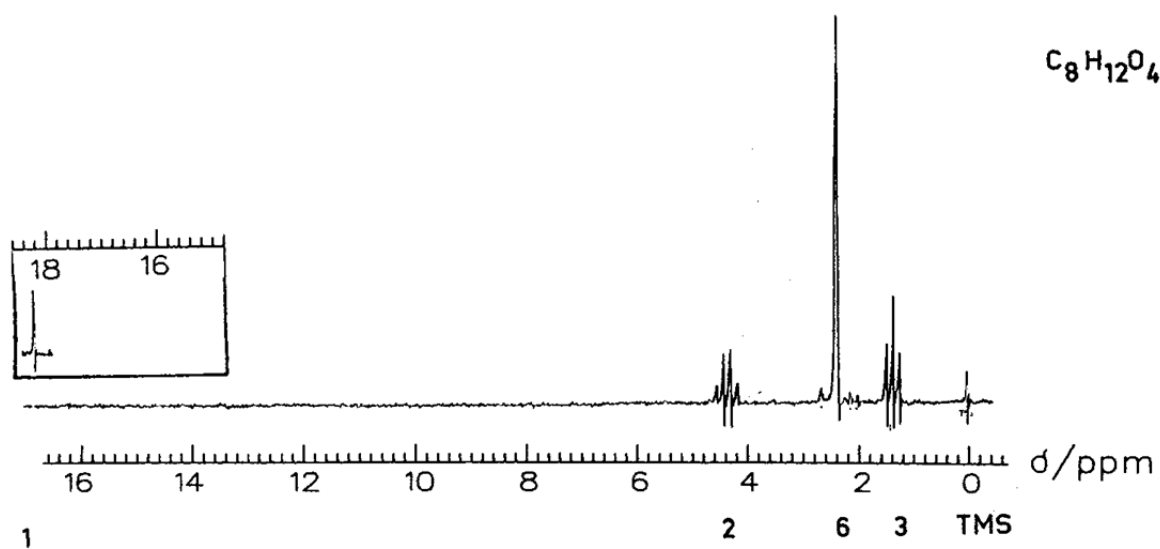




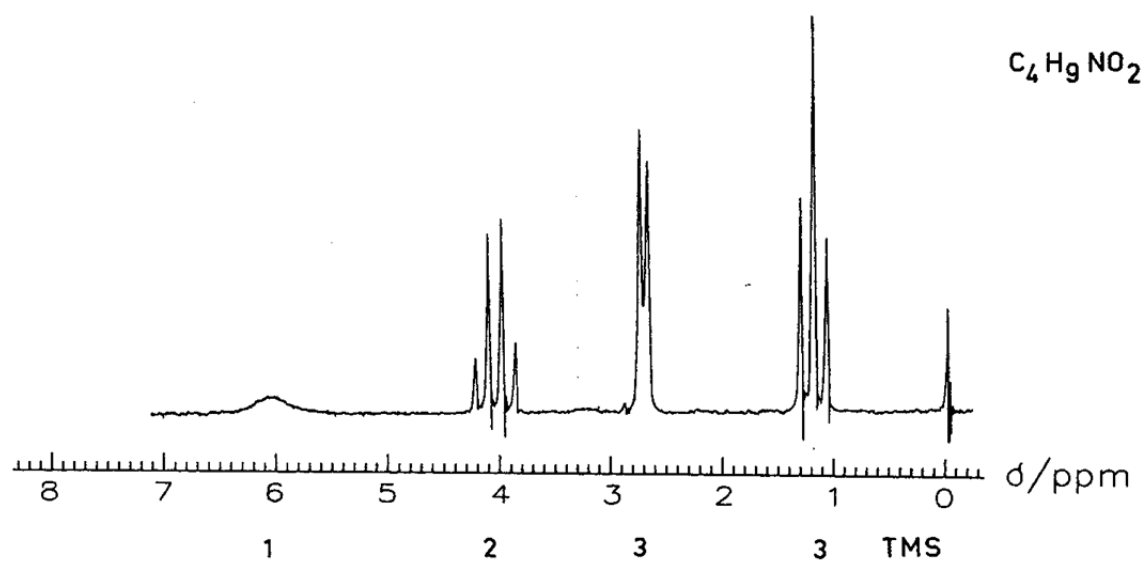
Упражнение 40.



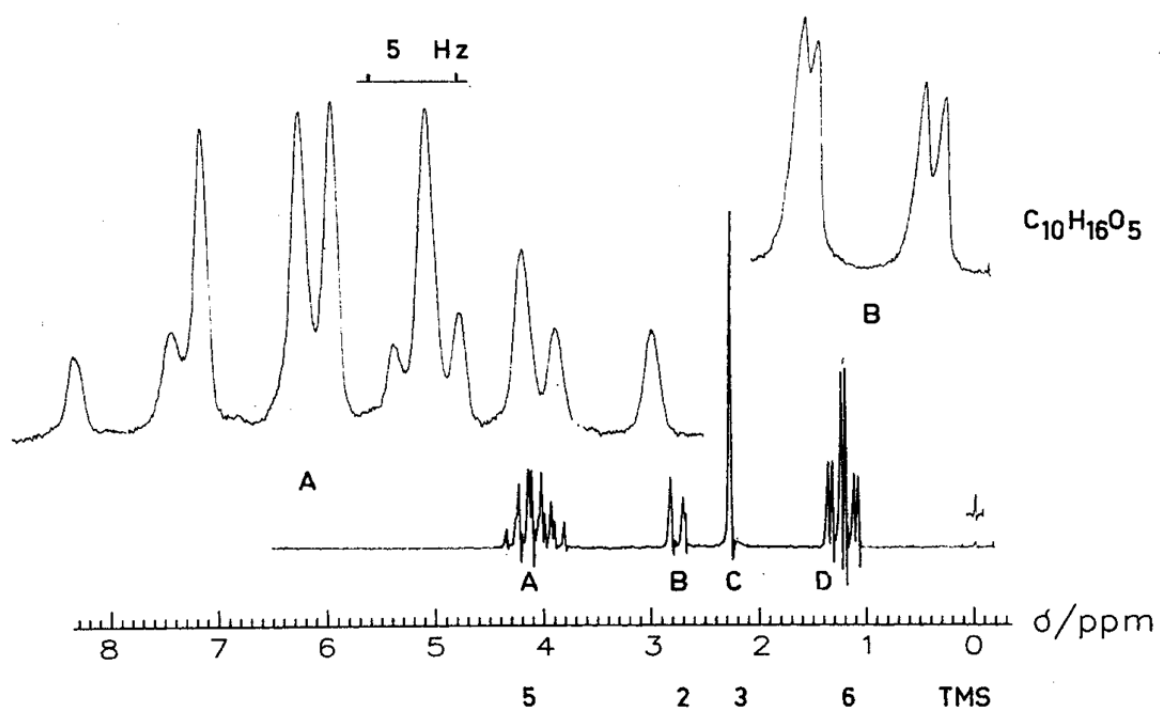
Упражнение 41.



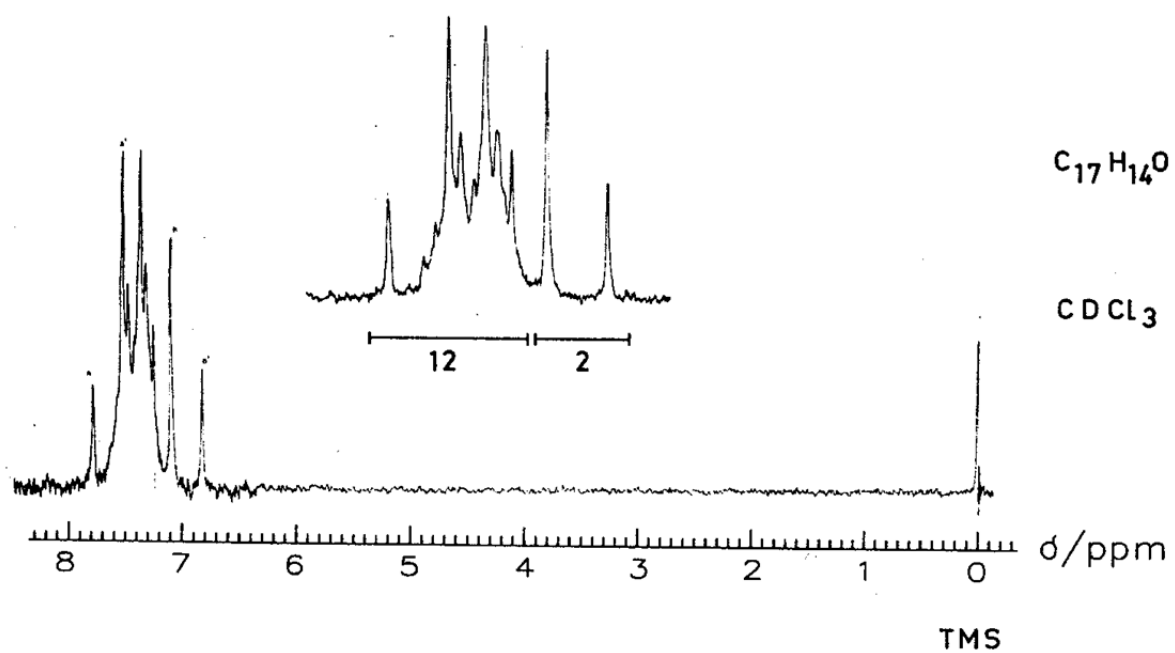
Упражнение 42.



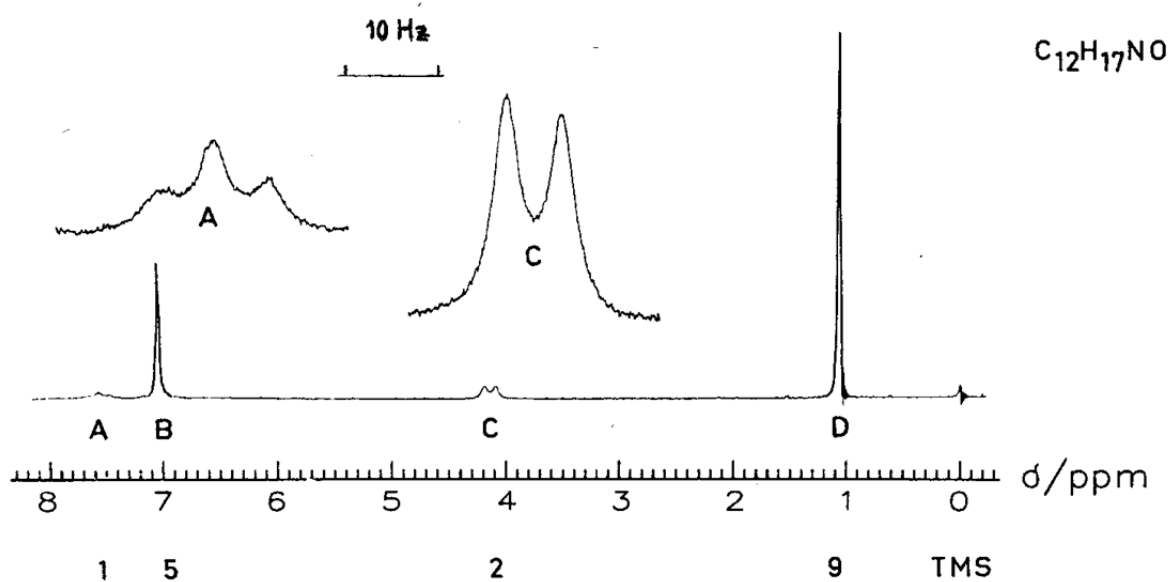
Упражнение 43.



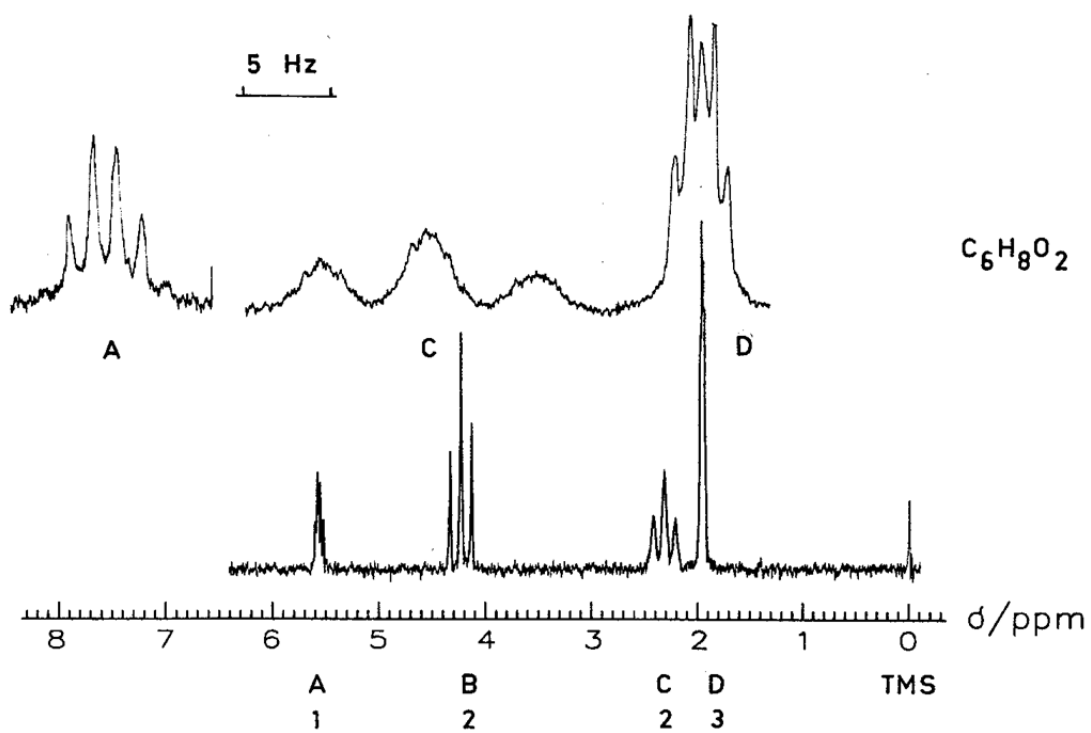
Упражнение 44.



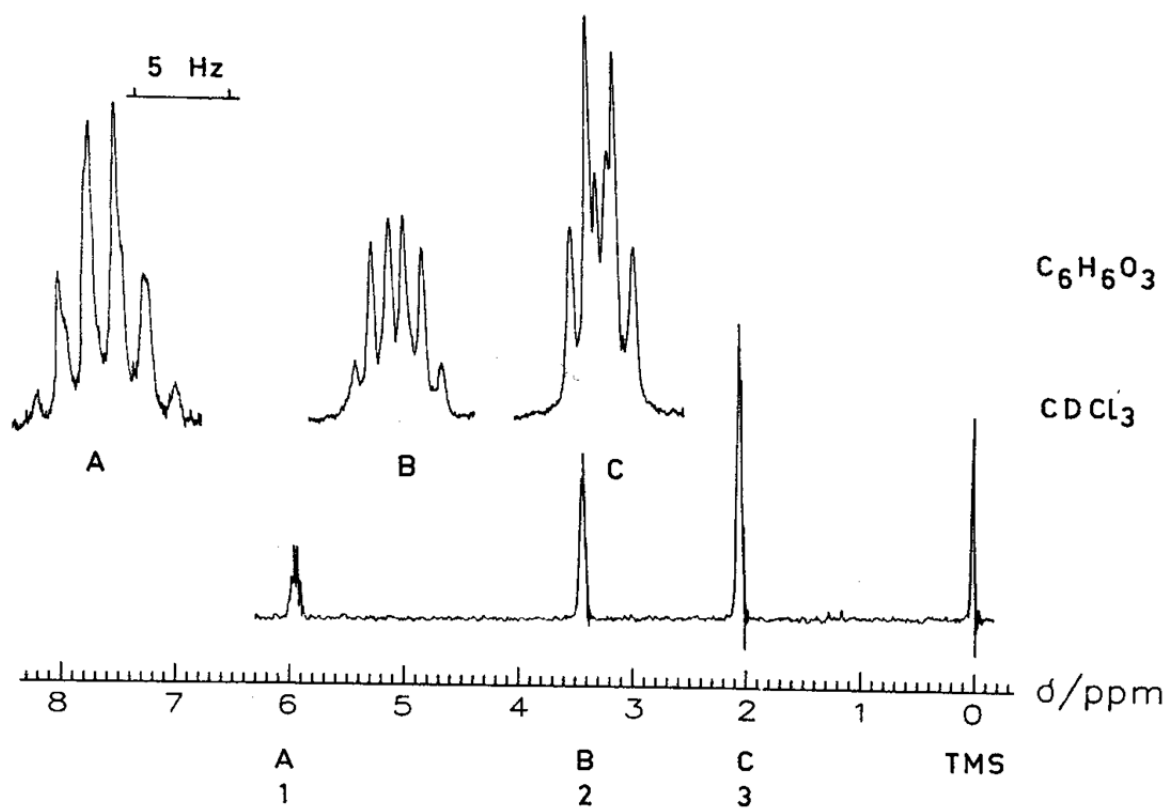
Упражнение 45.



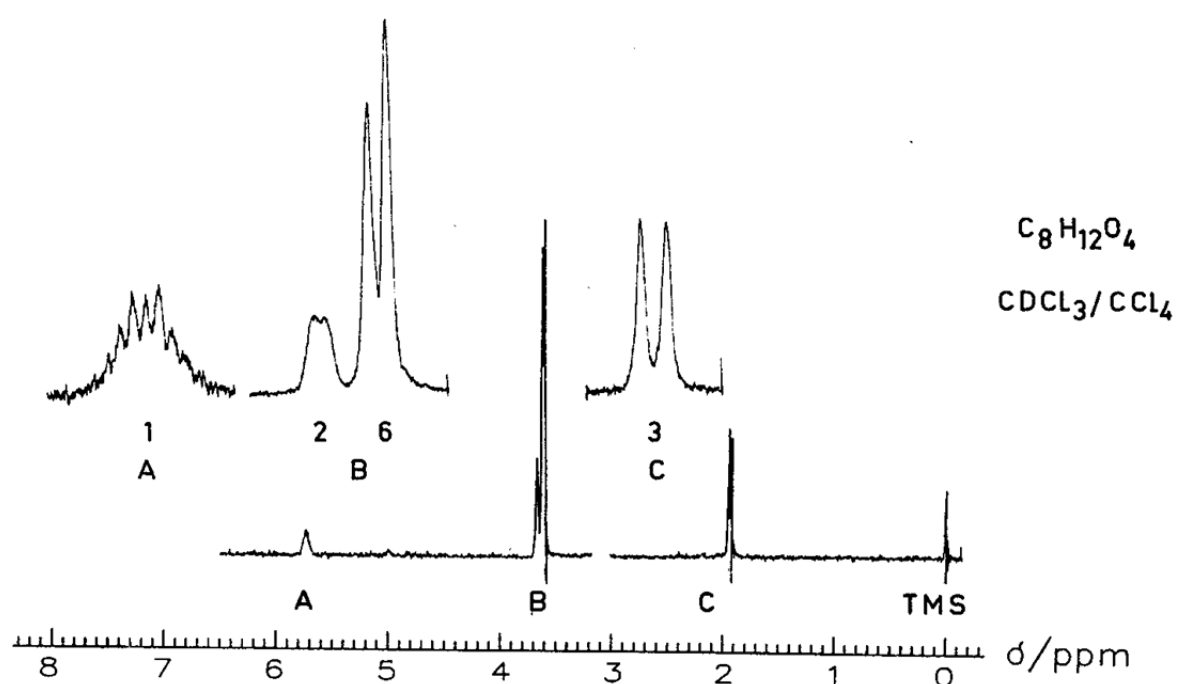
Упражнение 46.



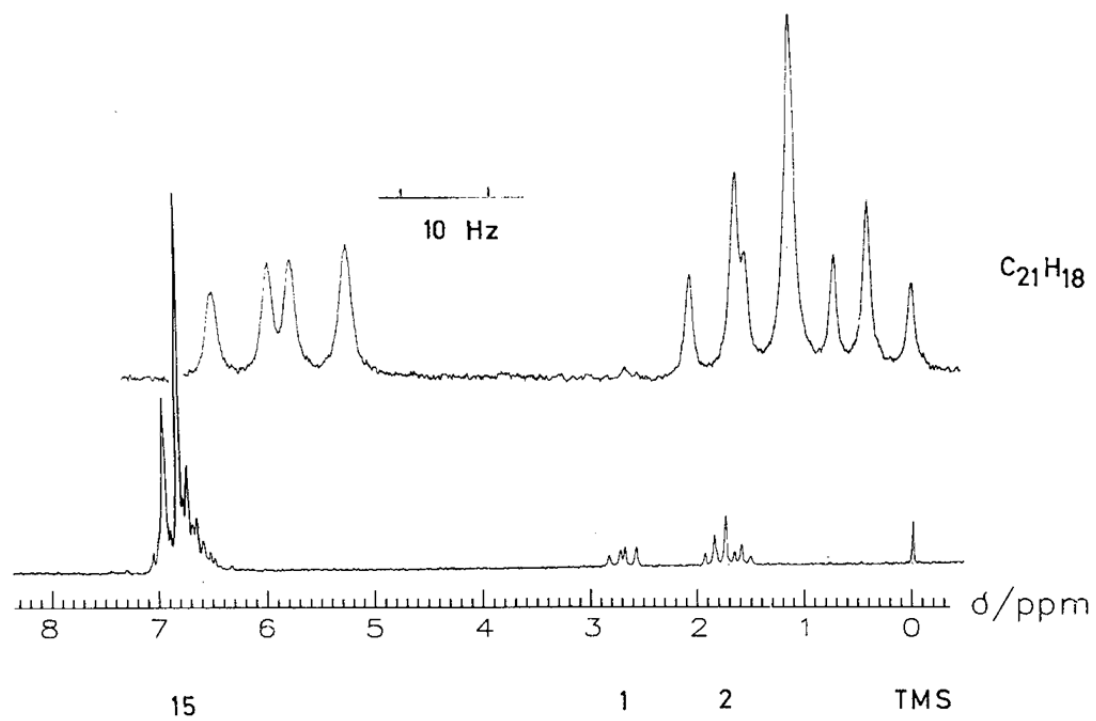
Упражнение 47.



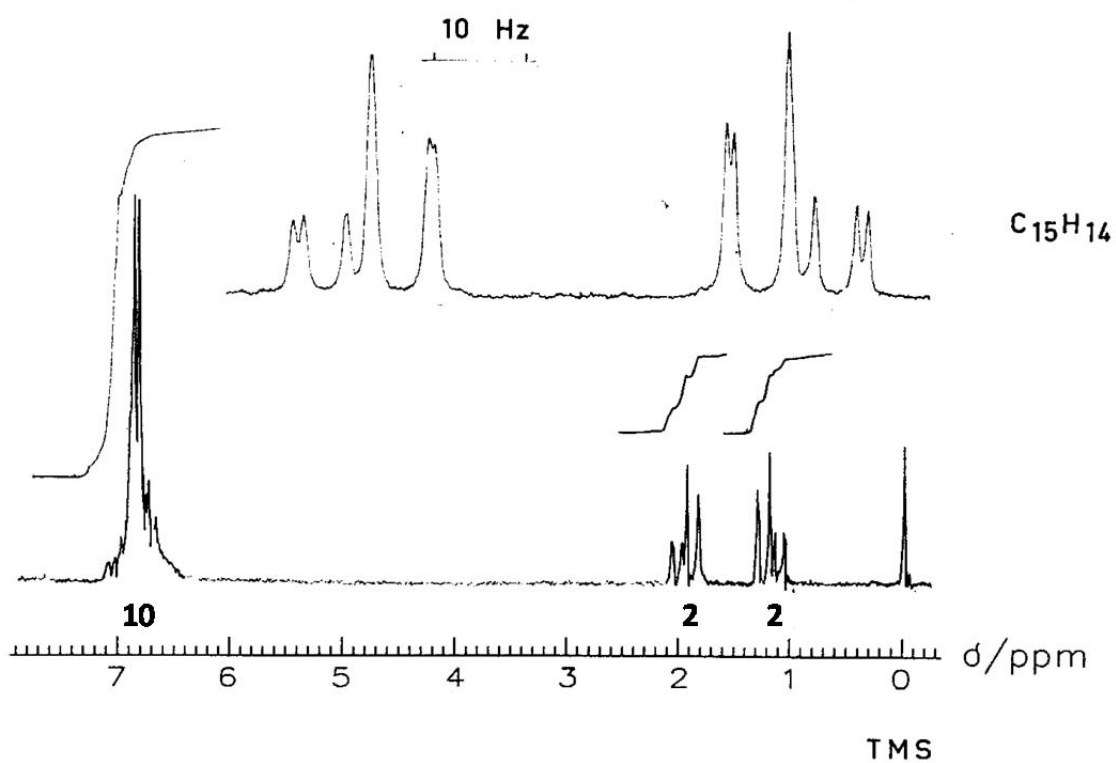
Упражнение 48.



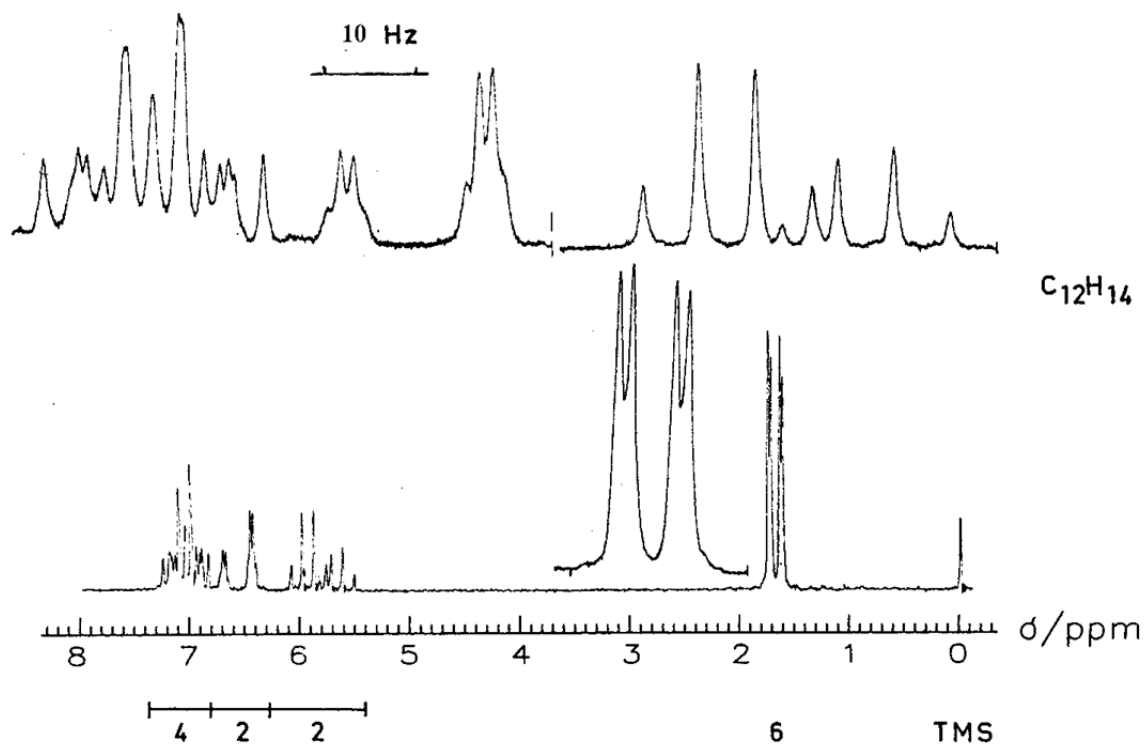
Упражнение 49.



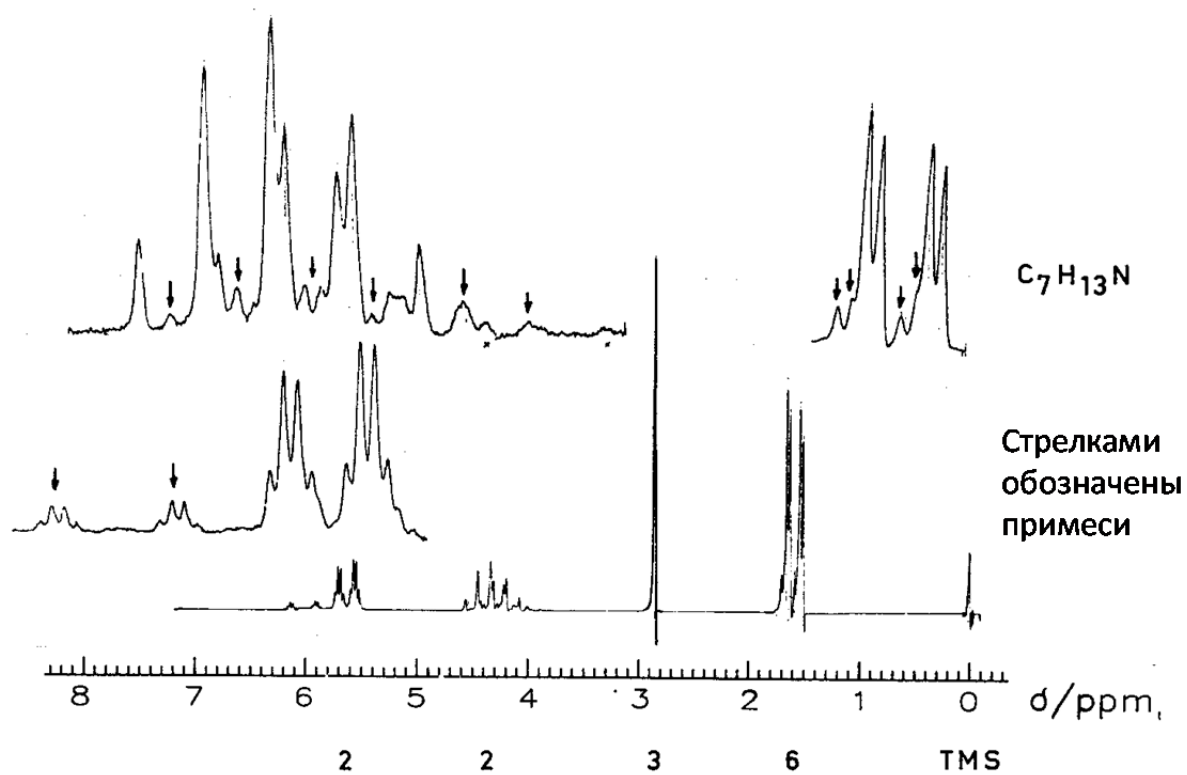
Упражнение 50.



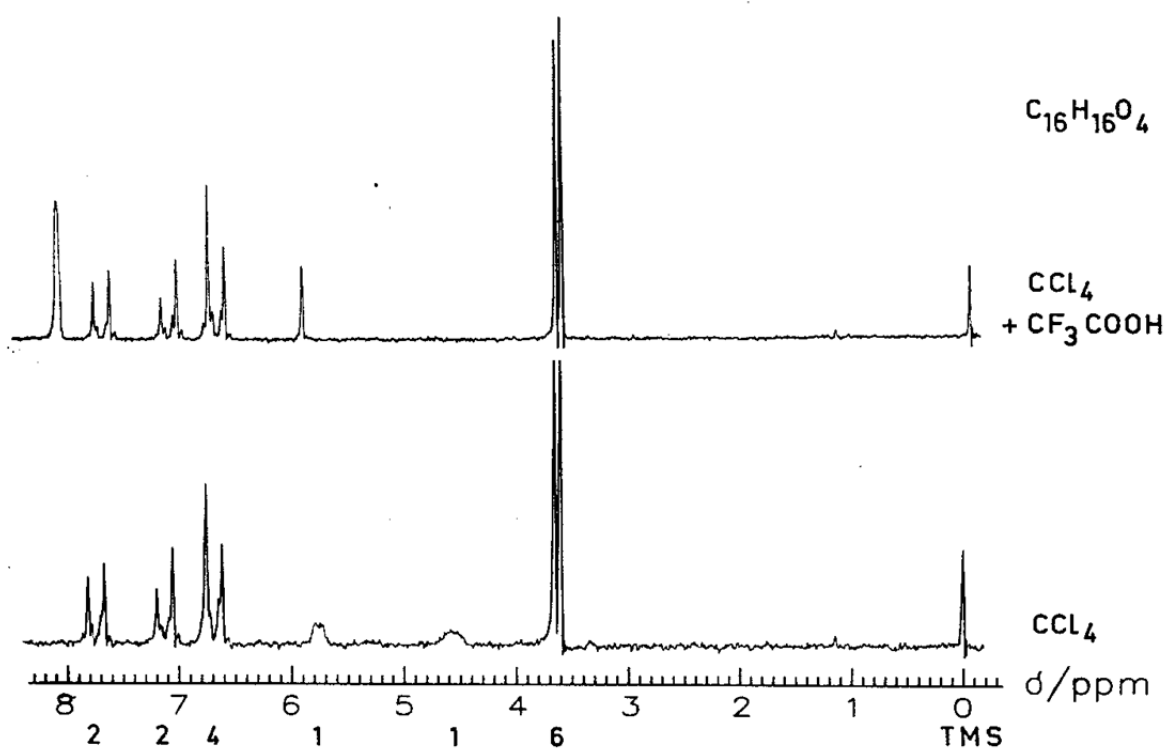
Упражнение 51.



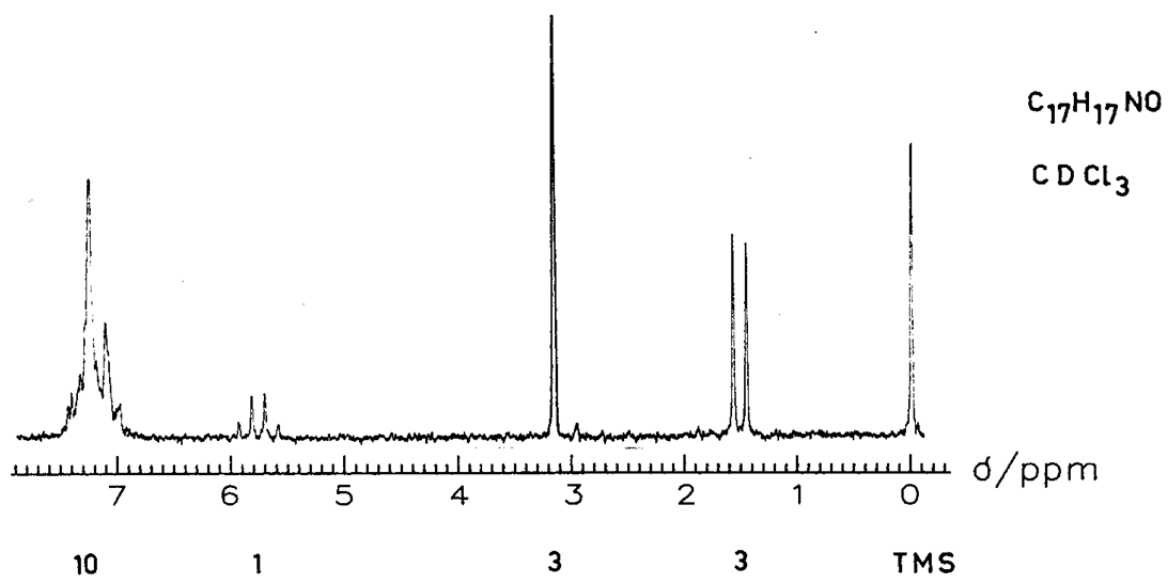
Упражнение 52.



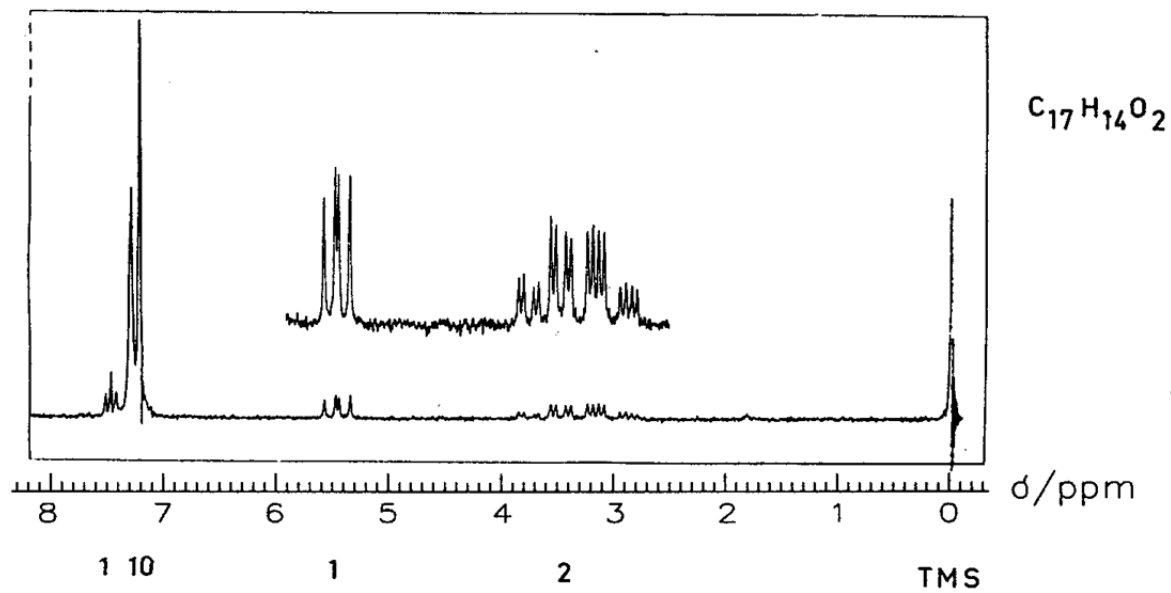
Упражнение 53.



Упражнение 54.



Упражнение 55.





## Справочные таблицы

### 1. Химические сдвиги в спектрах $^1\text{H}$ ЯМР, упорядоченные по структурному элементу

Структурный элемент	Химический сдвиг, м.д.	Число примеров, на которых собрана статистика	Реальный диапазон химических сдвигов в выборке, м.д.
---------------------	------------------------	---	--

#### 1.1. Алифатические протоны, отделенные от функциональной группы насыщенным атомом углерода

$\begin{array}{c} >\text{C}-\text{C}< \\   \\ \text{CH}_2 \end{array}$	0.24	2	
$-\text{CH}_3$	0.88	45	1.37-0.77
$-\text{CH}_2-$	1.35	20	1.48-1.25
$\geq\text{CH}$	1.5	2	1.56-1.44
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{N}< \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{N}< \end{array}$	1.01	14	1.18-0.88
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{N}-\text{CO}-\text{R} \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{CO}-\text{R} \end{array}$	1.34	6	1.62-1.20
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{N}-\text{CO}-\text{R} \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CO}-\text{R} \end{array}$	1.2	1	-
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{CO}-\text{R} \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{CO}-\text{R} \end{array}$	1.06	12	1.23-0.93
$\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{C}-\text{CO}-\text{R} \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CO}-\text{OR} \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CO}-\text{NR}_2 \end{array}$	1.75	5	1.9-1.63
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{CO}-\text{OR} \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CO}-\text{NR}_2 \end{array}$	1.19	2	1.23-1.15
$\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{C}-\text{CO}-\text{OR} \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{CO}-\text{NR}_2 \end{array}$	2.09	4	2.31-1.84
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{CO}-\text{Cl} \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{C}=\text{C}< \end{array}$	1.72	1	-
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{C}=\text{C}< \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{C}=\text{C}< \end{array}$	1.19	4	1.30-0.97
$\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{C}-\text{C}=\text{C}< \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{Ar} \end{array}$	1.50	4	1.65-1.18
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{Ar} \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{Ar} \end{array}$	1.2	15	1.53-1.10
$\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{C}-\text{Ar} \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{OR} \end{array}$	1.67	5	1.78-1.60
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{OR} \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{OR} \end{array}$	1.21	35	1.45-1.08
$\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{C}-\text{OR} \\   \\ >\text{CH}-\text{C}-\text{OR} \end{array}$	1.35	10	1.81-1.21
$\begin{array}{c} >\text{CH}-\text{C}-\text{OR} \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{O}-\text{CO}-\text{R} \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{O}-\text{Ar} \end{array}$	1.96	2	2.00-1.92
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{O}-\text{CO}-\text{R} \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{O}-\text{Ar} \end{array}$	1.2	32	1.45-1.13
$\begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{C}-\text{O}-\text{CO}-\text{R} \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{O}-\text{Ar} \end{array}$	1.50	2	-
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{Cl} \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{Cl} \end{array}$	1.49	10	1.60-1.48
$\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{C}-\text{Cl} \\   \\ >\text{CH}-\text{C}-\text{Cl} \end{array}$	1.70	9	1.96-1.60
$\begin{array}{c} >\text{CH}-\text{C}-\text{Cl} \\   \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{Br} \end{array}$	1.51	2	1.58-1.45
$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{Br} \\   \\ -\text{CH}_2-\text{C}-\text{Br} \end{array}$	1.65	9	1.76-1.58
$\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{C}-\text{Br} \end{array}$	1.75	8	2.03-1.68

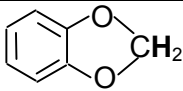
$\text{>CH}-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{Br}$	1.74	2	1.80-1.68
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{I}$	1.91	7	1.98-1.86
$-\text{CH}_2-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{I}$	1.70	5	1.86-1.65
$\text{>CH}-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{I}$	1.49	2	1.56-1.43
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{SO}_2\text{R}$	1.56	1	-
$-\text{CH}_2-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{SO}_2\text{R}$	2.16	1	-
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{NO}_2$	1.55	3	1.57-1.52
$-\text{CH}_2-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{NO}_2$	1.99	2	2.07-1.90

## 1.2. Алифатические протоны рядом с функциональной группой

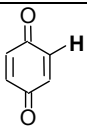
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$	1.64	31	2.14-1.53
$-\text{CH}_2-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$	1.95	25	2.31-1.83
$\text{>CH}-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$	2.78	1	-
$-\text{CH}_2-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$	1.2	1	-
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{CO}-\text{R}$	2.01	3	2.06-1.93
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}-\text{CO}-\text{R}$ $\quad \quad \quad \text{C}$ $\quad \quad \quad \diagup \quad \diagdown$	1.75	1	-
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$ $\quad \quad \quad \text{CO}-\text{NH}_2$	1.95	1	-
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$ $\quad \quad \quad \text{X} \quad \text{X} = \text{COOH}, \text{CN}$	1.97	5	2.03-1.94
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$ $\quad \quad \quad \text{O}-\text{COR}$	1.89	3	1.91-1.87
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$ $\quad \quad \quad \text{C}=\text{C}<$	1.83	7	
$\text{CH}_3-\text{Ar}$	2.26	35	2.49-2.14
$-\text{CH}_2-\text{Ar}$	2.72	6	3.05-2.53
$\text{>CH}-\text{Ar}$	2.90	6	3.17-2.75
$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-$	1.80	1	
$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{N}$	1.97	1	-
$-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$	2.57	5	2.72-2.17
$\text{>CH}-\text{C}\equiv\text{N}$	2.72	1	-
$-\text{CH}_2-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{N}}}-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{OH}}}$	1.81	1	-
$\text{CH}_3-\text{CO}-\text{R}$	2.09	59	2.47-1.78
$-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{R}$	2.20	29	2.47-2.02
$\text{>CH}-\text{CO}-\text{R}, \text{R} = \text{H}, \text{CR}_3, \text{OH}, \text{OR}, \text{NR}_2$	2.73	2	2.98-2.48
$\text{CH}_3-\text{CO}-\text{Cl}, \text{CH}_3-\text{CO}-\text{Br}$	2.73	2	2.81-2.66
$\text{CH}_3-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{CO}}}-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$ $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{Ar}$	2.23	17	2.68-1.83
$-\text{CH}_2-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{CO}}}-\overset{\textstyle  }{\underset{\textstyle  }{\text{C}}}=\text{C}<$ $-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{Ar}$	2.74	3	2.93-2.60
$\text{CH}_3-\text{CO}-\text{S}-\text{R}$	2.42	3	2.54-2.33
$\text{CH}_3-\text{S}-\text{R}$	2.10	4	2.12-2.08

-CH <sub>2</sub> -S-R	2.42	7	2.82-2.39
$\begin{array}{c} \text{-N} \quad \text{C} < \\ \quad \diagdown \\ \quad \text{CH}_2 \end{array}$	1.48	1	-
CH <sub>3</sub> -N<	2.22	20	2.57-1.92
-CH <sub>2</sub> -N<	2.59	17	3.12-2.28
>CH-N<	2.80	3	2.87-2.75
CH <sub>3</sub> -N-X X = CO-R, SO <sub>2</sub> R, Ar	2.97	12	3.10-2.85
-CH <sub>2</sub> -N-X X = CO-R, SO <sub>2</sub> R, Ar	3.37	5	3.57-3.22
CH <sub>3</sub> -N <sup>+</sup>	3.33	1	-
-CH <sub>2</sub> -N <sup>+</sup>	3.40	1	-
-CH <sub>2</sub> -N <sup>+</sup> -N<	2.33	1	-
$\begin{array}{c} >\text{C} - \text{O} \\ \quad \diagdown \\ \quad \text{CH}_2 \end{array}$	2.53	3	2.72-2.29
$\begin{array}{c} >\text{C} - \text{O} \\ \quad \diagdown \\ \quad \text{CH} \end{array}$	2.81	2	2.98-2.66
CH <sub>3</sub> -OR	3.32	18	3.56-3.19
-CH <sub>2</sub> -OR	3.45	28	3.80-2.31
>CH-OR	3.68	14	4.05-3.38
CH <sub>3</sub> -O-CO-R, CH <sub>3</sub> -O-Ar	3.81	65	4.12-3.61
-CH <sub>2</sub> -O-CO-R, -CH <sub>2</sub> -O-Ar	4.10	37	4.37-3.92
>CH-O-CO-R, >CH-O-Ar	4.82	6	5.17-4.62
CH <sub>3</sub> -Cl	3.13	1	-
-CH <sub>2</sub> Cl	3.44	14	3.57-3.35
>CH-Cl	3.97	6	4.13-3.89
CH <sub>3</sub> -Br	2.61	1	-
-CH <sub>2</sub> -Br	3.35	19	3.58-3.25
>CH-Br	4.10	6	4.20-4.03
CH <sub>3</sub> -I	2.10	1	-
-CH <sub>2</sub> -I	3.11	10	3.20-3.03
>CH-I	4.18	4	
CH <sub>3</sub> -F	4.26	1	
CH <sub>3</sub> -SO-R	2.50	1	
CH <sub>3</sub> -SO <sub>2</sub> -R	3.13	1	
-CH <sub>2</sub> -SO <sub>2</sub> -R	2.92	1	
CH <sub>3</sub> -SO <sub>2</sub> -Cl	3.64	1	
CH <sub>3</sub> -SO <sub>2</sub> -F	3.27	1	
-CH <sub>2</sub> -SO <sub>2</sub> -F	3.28	1	
CH <sub>3</sub> -O-SO-OR	3.58	1	
CH <sub>3</sub> -O-SO <sub>2</sub> -OR	3.94	1	
CH <sub>3</sub> -SCN	2.63	1	
CH <sub>3</sub> -NCS	3.61	1	

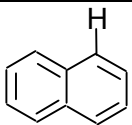
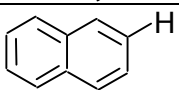
### 1.3. Алифатические протоны рядом с двумя и более функциональными группами

$\text{CH}_2(\overset{ }{\text{C}}=\overset{ }{\text{C}}-)_2$	2.85	2	2.90-2.80
$-\text{CH}(\overset{ }{\text{C}}=\overset{ }{\text{C}}-)_2$	3.47	1	
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{Ar}$	3.95	5	4.27-3.81
$\text{Ar}-\overset{ }{\text{CH}}-\text{Ar}$	4.19	1	
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{N}<$	3.56	5	3.78-3.32
$\text{Ar}-\overset{ }{\text{CH}}-\text{N}<$	4.04	2	4.10-3.97
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{OR}$	4.46	4	4.58-4.36
$\text{Ar}-\overset{ }{\text{CH}}-\text{OR}$	4.77	1	
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{Cl}$	4.50	2	
$\text{Ar}-\overset{ }{\text{CH}}-\text{Cl}$	6.41	1	
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{Br}$	4.42	2	4.43-4.41
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CO}-\text{R}$	5.26	1	
$\text{Ar}-\overset{ }{\text{CH}}-\text{O}-\text{CO}-\text{R}$	5.47	1	
$-\overset{ }{\text{C}}=\overset{ }{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{OR}$	3.94	7	4.15-3.90
$-\overset{ }{\text{C}}=\overset{ }{\text{C}}-\overset{ }{\text{CH}}-\text{OR}$	4.11	1	
$-\overset{ }{\text{C}}=\overset{ }{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{Cl}$	4.05	3	4.15-3.96
$-\overset{ }{\text{C}}=\overset{ }{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{Br}$	4.12	4	4.39-3.85
$-\overset{ }{\text{C}}\equiv\overset{ }{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{OR}$	4.20	2	4.22-4.18
$-\overset{ }{\text{C}}\equiv\overset{ }{\text{C}}-\overset{ }{\text{CH}}-\text{OR}$	4.18	1	
$-\overset{ }{\text{C}}\equiv\overset{ }{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{Cl}$	4.12	2	4.16-4.09
$-\overset{ }{\text{C}}\equiv\overset{ }{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{Br}$	3.82	1	
$\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CN}$	4.07	1	-
$\text{Br}-\text{CH}_2-\text{CN}$	3.70	1	-
$\text{CH}_2(\text{OR})_2$	4.75	4	5.00-4.49
	6.00	16	6.23-5.86
$\text{CH}_2(\text{OR})_2\text{CH}(\text{OR})_3$	4.96	1	-
$\text{CH}_2\text{Cl}_2$	5.33	1	-
$-\text{CHCl}_2$	5.86	2	5.95-5.77
$\text{CH}_2\text{I}_2$	3.90	1	-
$\text{CHCl}_3$	7.27	1	-
$\text{CHBr}_3$	6.82	1	-
$\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{Br}$	5.16	1	-
$\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{J}$	4.99	1	-
$\text{CH}_2(\text{CO}-\text{R})_2$	3.44	2	3.52-3.37
$-\text{CH}(\text{CO}-\text{R})_2$ , R = H, CR <sub>3</sub> , OH, OR, NR <sub>2</sub>	3.98	1	

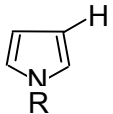
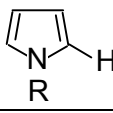
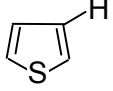
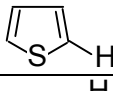
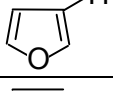
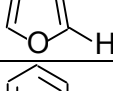
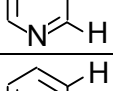
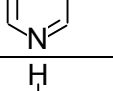
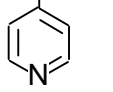
#### 1.4. Олефиновые и ацетиленовые протоны

$\text{-C}\equiv\text{C-H}$	2.51	10	2.93-2.33
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}<$	4.66	9	4.82-4.58
$\text{-HC}=\text{C}<$	5.21	19	5.68-5.12
$>\text{C}=\text{CH-CO-R}$	5.79	8	6.05-5.68
$\text{-CH}=\text{C-CO-R}$ , $\text{R} = \text{H}$ , $\text{CR}_3$ , $\text{OH}$ , $\text{OR}$ , $\text{NR}_2$	6.47	8	7.04-5.47
$>\text{C}=\text{CH-O-R}$	6.35	3	6.45-6.22
$\text{-CH}=\text{C-OR}$	4.58	6	5.55-4.05
$>\text{C}=\text{CH-O-CO-R}$	7.25	1	-
$\text{-CH}=\text{C-O-CO-R}$	4.85	3	5.06-4.55
$\text{R-CO-CH}=\text{C-O-CO-R}$	6.08	2	6.13-6.03
	6.80	2	6.85-6.76
$\text{Br-CH}=\text{C}<$	6.81	2	7.00-6.62
$\text{-CH}=\text{C-CN}$	5.75	1	-
$\text{Ar-C}=\text{CH-}$	5.51	6	6.08-5.05
$\text{Ar-CH}=\text{C}<$	6.25	2	6.28-6.23
$\text{Ar-C}=\text{CH-CO-R}$ $\text{R} = \text{H}$ , $\text{CR}_3$ , $\text{OH}$ , $\text{OR}$	6.57	6	6.95-6.28
$\text{Ar-CH}=\text{C-CO-R}$ $\text{R} = \text{H}$ , $\text{CR}_3$ , $\text{OH}$ , $\text{OR}$	7.55	6	7.83-7.38
$\text{Ar-CH}=\text{C-Ar}$	6.88	3	7.10-6.55
$\text{Ar-CH}=\text{C-Br}$	7.05	1	-
$\text{Ar-C}=\text{CH-Br}$	7.61	1	

#### 1.5. Производные бензола

$\text{C}_6\text{H}_5\text{-R}$ , $\text{R}=\text{Alkyl}$ , $\text{Hal}$	7.19	15	7.32-7.09
$\text{C}_6\text{H}_5\text{-NH}_2$	6.53	1	-
$\text{C}_6\text{H}_4(\text{Hal})_2$	7.32	3	7.38-7.24
$\text{C}_6\text{H}_4\text{R}_2$	6.89	13	7.07-6.64
$\text{C}_6\text{H}_5\text{-OR}$	6.77	2	-
$\text{C}_6\text{H}_4(\text{OR})_2$	6.68	2	-
$\text{C}_6\text{H}_5\text{-NO}_2$	7.72	1	-
$\text{C}_6\text{H}_5\text{-C}=\text{C-}$	7.27	6	7.46-7.11
$\text{C}_6\text{H}_5\text{-C}\equiv\text{C-}$	7.32	1	-
$\text{C}_6\text{H}_5\text{-CO-R}$ , $\text{R}=\text{H}$ , $\text{CR}_3$ , $\text{OR}$ , $\text{CN}$	7.50	3	7.54-7.47
	7.73	1	
	7.37	1	

## 1.6. Гетероциклические соединения

	6.6
	6.1
	7.2
	7.0
	4.4
	5.7-6.3
	8.5
	6.9-7.3
	7.4-7.7

## 1.7. Альдегиды

$R-CH=O$	9.66	5	9.80-9.47
$-C=C-CH=O$	9.57	3	9.68-9.43
$Ar-CH=O$	9.88	12	10.08-9.65

## 1.8. Разное

$R-O-CO-H$	8.03	1	
$Ar-CH=N-N-$	8.55	1	
$R-NH_2, R_2NH$	$\approx 1.55$		
$R-OH$	$\approx 1$		Мономер
$(R-OH)_n$	$\approx 5 - 6$		Водородная связь
$Ar-OH$	7		Мономер
$Ar-OH$	$>10$		Водородная связь
$R-COOH$	$\approx 10$		Циклические димеры
$RCOO \cdots H \cdots OCOR^-$	20		Водородно-связанные анионы


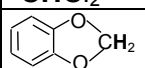


## 2. Химические сдвиги, упорядоченные по величине в м.д.


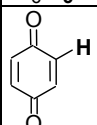



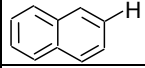



Структурный элемент	Средний химсдвиг, м.д.	Число примеров	Диапазон химсдвигов, м.д.
R-NH <sub>2</sub> , R <sub>2</sub> NH	≈ 1.55		
R-OH	≈ 1		
(R-OH) <sub>n</sub>	≈ 5 - 6		
R-COOH	≈ 10		
$\begin{array}{c} >C - C< \\   \\ CH_2 \end{array}$	0.24	2	
-CH <sub>3</sub>	0.88	45	1.37-0.77
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - N < \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.01	14	1.18-0.88
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - CO - R \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.06	12	1.23-0.93
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - CO - OR \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.19	2	1.23-1.15
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - CO - NR_2 \\   \\ CH_3 \end{array}$			
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - C = C < \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.19	4	1.30-0.97
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - N - CO - R \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.2	1	-
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - Ar \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.2	15	1.53-1.10
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - O - CO - R \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.2	32	1.45-1.13
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - O - Ar \\   \\ CH_3 \end{array}$			
-CH <sub>2</sub> -C=C-C=C<	1.2	1	-
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - OR \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.21	35	1.45-1.08
-CH <sub>2</sub> -C-N<	1.34	6	1.62-1.20
-CH <sub>2</sub> -	1.35	20	1.48-1.25
-CH <sub>2</sub> -C-OR	1.35	10	1.81-1.21
$\begin{array}{c} >N - C< \\   \\ CH_2 \end{array}$	1.48	1	-
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - Cl \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.49	10	1.60-1.48
>CH-C-I	1.49	2	1.56-1.43
>CH	1.5	2	1.56-1.44
-CH <sub>2</sub> -C-C=C<	1.50	4	1.65-1.18
$\begin{array}{c} CH_2 - \overset{ }{C} - O - CO - R \\   \\ CH_2 \end{array}$	1.50	2	-
$\begin{array}{c} CH_2 - \overset{ }{C} - O - Ar \\   \\ CH_2 \end{array}$			
>CH-C-Cl	1.51	2	1.58-1.45
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - NO_2 \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.55	3	1.57-1.52
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - SO_2R \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.56	1	-
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} = C < \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.64	31	2.14-1.53
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - Br \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.65	9	1.76-1.58
-CH <sub>2</sub> -C-Ar	1.67	5	1.78-1.60
-CH <sub>2</sub> -C-Cl	1.70	9	1.96-1.60
-CH <sub>2</sub> -C-I	1.70	5	1.86-1.65
$\begin{array}{c} CH_3 - \overset{ }{C} - CO - Cl \\   \\ CH_3 \end{array}$	1.72	1	-

$\text{>CH}-\overset{\text{Br}}{\underset{ }{\text{C}}}$	1.74	2	1.80-1.68
$-\text{CH}_2-\overset{\text{CO-R}}{\underset{ }{\text{C}}}$	1.75	5	1.9-1.63
$-\text{CH}_2-\overset{\text{Br}}{\underset{ }{\text{C}}}$	1.75	8	2.03-1.68
$\text{CH}_3-\overset{\text{CO-R}}{\underset{\text{C}}{\underset{  }{\text{C}}}}-\text{C}$	1.75	1	-
$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{C}-$	1.80	1	
$-\text{CH}_2-\overset{\text{N-OH}}{\underset{ }{\text{C}}}=\text{C}$	1.81	1	-
$\text{CH}_3-\overset{\text{C}}{\underset{\text{C}=\text{C}}{\text{C}}}=\text{C}$	1.83	7	
$\text{CH}_3-\overset{\text{O-COR}}{\underset{ }{\text{C}}}=\text{C}$	1.89	3	1.91-1.87
$\text{CH}_3-\overset{\text{J}}{\underset{ }{\text{C}}}$	1.91	7	1.98-1.86
$-\text{CH}_2-\overset{\text{C}}{\underset{ }{\text{C}}}=\text{C}$	1.95	25	2.31-1.83
$\text{CH}_3-\overset{\text{CO-NH}_2}{\underset{ }{\text{C}}}=\text{C}$	1.95	1	-
$\text{>CH}-\overset{\text{OR}}{\underset{ }{\text{C}}}$	1.96	2	2.00-1.92
$\text{CH}_3-\overset{\text{C}}{\underset{\text{X}}{\text{C}}}=\text{C}$ X = COOH, CN	1.97	5	2.03-1.94
$\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{N}$	1.97	1	-
$-\text{CH}_2-\overset{\text{NO}_2}{\underset{ }{\text{C}}}$	1.99	2	2.07-1.90
$\text{CH}_3-\overset{\text{CO-R}}{\underset{ }{\text{C}}}=\text{C}$	2.01	3	2.06-1.93
$-\text{CH}_2-\overset{\text{CO-OR}}{\underset{ }{\text{C}}}$ $-\text{CH}_2-\overset{\text{CO-NR}_2}{\underset{ }{\text{C}}}$	2.09	4	2.31-1.84
$\text{CH}_3-\text{CO-R}$	2.09	59	2.47-1.78
$\text{CH}_3-\text{S-R}$	2.10	4	2.12-2.08
$\text{CH}_3-\text{I}$	2.10	1	-
$-\text{CH}_2-\overset{\text{SO}_2\text{R}}{\underset{ }{\text{C}}}$	2.16	1	-
$-\text{CH}_2-\text{CO-R}$	2.20	29	2.47-2.02
$\text{CH}_3-\text{N}<$	2.22	20	2.57-1.92
$\text{CH}_3-\overset{\text{CO-C}=\text{C}}{\underset{ }{\text{C}}}$ $\text{CH}_3-\text{CO-Ar}$	2.23	17	2.68-1.83
$\text{CH}_3-\text{Ar}$	2.26	35	2.49-2.14
$-\text{CH}_2-\overset{\text{N}^+}{\underset{ }{\text{N}}}-\text{N}<$	2.33	1	-
$\text{CH}_3-\text{CO-S-R}$	2.42	3	2.54-2.33
$-\text{CH}_2-\text{S-R}$	2.42	7	2.82-2.39
$\text{CH}_3-\text{SO-R}$	2.50	1	
$-\text{C}\equiv\text{C-H}$	2.51	10	2.93-2.33
$\text{>C}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{CH}_2}{\text{C}}}$	2.53	3	2.72-2.29
$-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$	2.57	5	2.72-2.17
$-\text{CH}_2-\text{N}<$	2.59	17	3.12-2.28
$\text{CH}_3-\text{Br}$	2.61	1	-
$\text{CH}_3-\text{SCN}$	2.63	1	
$-\text{CH}_2-\text{Ar}$	2.72	6	3.05-2.53
$\text{>CH}-\text{C}\equiv\text{N}$	2.72	1	-



$>\text{CH}-\text{CO}-\text{R}$ , $\text{R} = \text{H}, \text{CR}_3, \text{OH}, \text{OR}, \text{NR}_2$	2.73	2	2.98-2.48
$\text{CH}_3-\text{CO}-\text{Cl}, \text{CH}_3-\text{CO}-\text{Br}$	2.73	2	2.81-2.66
$-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{C}=\text{C}<$ $-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{Ar}$	2.74	3	2.93-2.60
$>\text{CH}-\text{C}=\text{C}<$	2.78	1	-
$>\text{CH}-\text{N}<$	2.80	3	2.87-2.75
$>\text{C}-\text{O}$ $\quad \quad \text{CH}$	2.81	2	2.98-2.66
$\text{CH}_2(-\text{C}=\text{C}-)_2$	2.85	2	2.90-2.80
$>\text{CH}-\text{Ar}$	2.90	6	3.17-2.75
$-\text{CH}_2-\text{SO}_2-\text{R}$	2.92	1	
$\text{CH}_3-\text{N}^+-\text{X}$ $\text{X} = \text{CO}-\text{R}, \text{SO}_2\text{R}, \text{Ar}$	2.97	12	3.10-2.85
$-\text{CH}_2-\text{I}$	3.11	10	3.20-3.03
$\text{CH}_3-\text{Cl}$	3.13	1	-
$\text{CH}_3-\text{SO}_2-\text{R}$	3.13	1	
$\text{CH}_3-\text{SO}_2-\text{F}$	3.27	1	
$-\text{CH}_2-\text{SO}_2-\text{F}$	3.28	1	
$\text{CH}_3-\text{OR}$	3.32	18	3.56-3.19
$\text{CH}_3-\text{N}^+-$	3.33	1	-
$-\text{CH}_2-\text{Br}$	3.35	19	3.58-3.25
$-\text{CH}_2-\text{N}-\text{X}$ $\text{X} = \text{CO}-\text{R}, \text{SO}_2\text{R}, \text{Ar}$	3.37	5	3.57-3.22
$-\text{CH}_2-\text{N}^+-$	3.40	1	-
$-\text{CH}_2\text{Cl}$	3.44	14	3.57-3.35
$\text{CH}_2(\text{CO}-\text{R})_2$	3.44	2	3.52-3.37
$-\text{CH}_2-\text{OR}$	3.45	28	3.80-2.31
$-\text{CH}(-\text{C}=\text{C}-)_2$	3.47	1	
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{N}<$	3.56	5	3.78-3.32
$\text{CH}_3-\text{O}-\text{SO}-\text{OR}$	3.58	1	
$\text{CH}_3-\text{NCS}$	3.61	1	
$\text{CH}_3-\text{SO}_2-\text{Cl}$	3.64	1	
$>\text{CH}-\text{OR}$	3.68	14	4.05-3.38
$\text{Br}-\text{CH}_2-\text{CN}$	3.70	1	-
$\text{CH}_3-\text{O}-\text{CO}-\text{R}, \text{CH}_3-\text{O}-\text{Ar}$	3.81	65	4.12-3.61
$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-\text{Br}$	3.82	1	
$\text{CH}_2\text{I}_2$	3.90	1	-
$\text{CH}_3-\text{O}-\text{SO}_2-\text{OR}$	3.94	1	
$-\text{C}=\text{C}-\text{CH}_2-\text{OR}$	3.94	7	4.15-3.90
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{Ar}$	3.95	5	4.27-3.81
$>\text{CH}-\text{Cl}$	3.97	6	4.13-3.89
$-\text{CH}(\text{CO}-\text{R})_2$ , $\text{R} = \text{H}, \text{CR}_3, \text{OH}, \text{OR}, \text{NR}_2$	3.98	1	
$\text{Ar}-\text{CH}-\text{N}<$	4.04	2	4.10-3.97
$-\text{C}=\text{C}-\text{CH}_2-\text{Cl}$	4.05	3	4.15-3.96
$\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CN}$	4.07	1	-
$-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CO}-\text{R}, -\text{CH}_2-\text{O}-\text{Ar}$	4.10	37	4.37-3.92

$>\text{CH}-\text{Br}$	4.10	6	4.20-4.03
$-\text{C}=\text{C}-\text{CH}-\text{OR}$	4.11	1	
$-\text{C}=\text{C}-\text{CH}_2-\text{Br}$	4.12	4	4.39-3.85
$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-\text{Cl}$	4.12	2	4.16-4.09
$>\text{CH}-\text{I}$	4.18	4	
$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}-\text{OR}$	4.18	1	
$\text{Ar}-\text{CH}-\text{Ar}$	4.19	1	
$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-\text{OR}$	4.20	2	4.22-4.18
$\text{CH}_3-\text{F}$	4.26	1	
	4.38	1	
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{Br}$	4.42	2	4.43-4.41
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{OR}$	4.46	4	4.58-4.36
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{Cl}$	4.50	2	
$-\text{CH}=\text{C}-\text{OR}$	4.58	6	5.55-4.05
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}<$	4.66	9	4.82-4.58
$\text{CH}_2(\text{OR})_2$	4.75	4	5.00-4.49
$\text{Ar}-\text{CH}-\text{OR}$	4.77	1	
$>\text{CH}-\text{O}-\text{CO}-\text{R}, >\text{CH}-\text{O}-\text{Ar}$	4.82	6	5.17-4.62
$-\text{CH}=\text{C}-\text{O}-\text{CO}-\text{R}$	4.85	3	5.06-4.55
$\text{CH}_2(\text{OR})_2\text{CH}(\text{OR})_3$	4.96	1	-
$\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{J}$	4.99	1	-
$\text{Cl}-\text{CH}_2-\text{Br}$	5.16	1	-
$-\text{HC}=\text{C}<$	5.21	19	5.68-5.12
$\text{Ar}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CO}-\text{R}$	5.26	1	
$\text{CH}_2\text{Cl}_2$	5.33	1	-
$\text{Ar}-\text{CH}-\text{O}-\text{CO}-\text{R}$	5.47	1	
$\text{Ar}-\text{C}=\text{CH}-$	5.51	6	6.08-5.05
$-\text{CH}=\text{C}-\text{CN}$	5.75	1	-
$>\text{C}=\text{CH}-\text{CO}-\text{R}$	5.79	8	6.05-5.68
$-\text{CHCl}_2$	5.86	2	5.95-5.77
	6.00	16	6.23-5.86
	6.00	2	6.30-5.70
$\text{R}-\text{CO}-\text{CH}=\text{C}-\text{O}-\text{CO}-\text{R}$	6.08	2	6.13-6.03
	6.09	1	
$\text{Ar}-\text{CH}=\text{C}<$	6.25	2	6.28-6.23
$>\text{C}=\text{CH}-\text{O}-\text{R}$	6.35	3	6.45-6.22
$\text{Ar}-\text{CH}-\text{Cl}$	6.41	1	
$-\text{CH}=\text{C}-\text{CO}-\text{R}, \text{R} = \text{H}, \text{CR}_3, \text{OH}, \text{OR}, \text{NR}_2$	6.47	8	7.04-5.47
$\text{C}_6\text{H}_5-\text{NH}_2$	6.53	1	-
$\text{Ar}-\text{C}=\text{CH}-\text{CO}-\text{R} \quad \text{R} = \text{H}, \text{CR}_3, \text{OH}, \text{OR}$	6.57	6	6.95-6.28

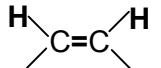
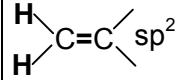
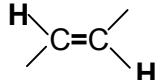
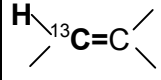
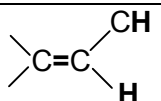
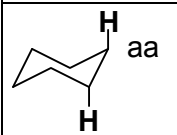
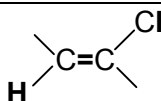
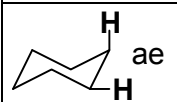
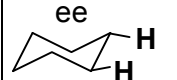
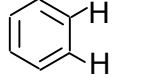
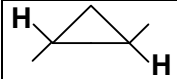
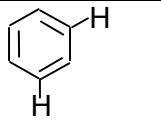
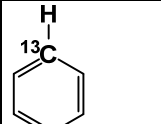
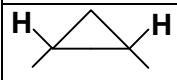
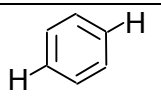
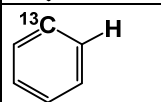
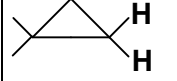
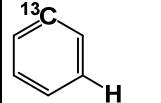
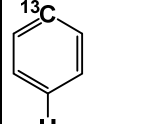
	6.60	1	
$C_6H_4(OR)_2$	6.68	2	-
$C_6H_5-OR$	6.77	2	-
	6.80	2	6.85-6.76
$Br-CH=C<$	6.81	2	7.00-6.62
$CHBr_3$	6.82	1	-
$Ar-CH=C-Ar$	6.88	3	7.10-6.55
$C_6H_4R_2$	6.89	13	7.07-6.64
$Ar-OH$	7		monomer
	7.04	1	
$Ar-CH=C-Br$	7.05	1	-
	7.14	8	7.27-6.95
$C_6H_5-R$ , R=Alkyl, Hal	7.19	15	7.32-7.09
	7.19	1	
$>C=CH-O-CO-R$	7.25	1	-
$CHCl_3$	7.27	1	-
$C_6H_5-C=C-$	7.27	6	7.46-7.11
$C_6H_4(Hal)_2$	7.32	3	7.38-7.24
$C_6H_5-C\equiv C-$	7.32	1	-
	7.37	1	
$C_6H_5-CO-R$ , R=H, $CR_3$ , OR, CN	7.50	3	7.54-7.47
$Ar-CH=C-CO-R$ R = H, $CR_3$ , OH, OR	7.55	6	7.83-7.38
	7.55	3	7.65-7.45
$Ar-C=CH-Br$	7.61	1	
$C_6H_5-NO_2$	7.72	1	-
	7.73	1	
$R-O-CO-H$	8.03	1	
	8.52	5	8.52-8.50
$Ar-CH=N-N-$	8.55	1	
$-C=C-CH=O$	9.57	3	9.68-9.43
$R-CH=O$	9.66	5	9.80-9.47
$Ar-CH=O$	9.88	12	10.08-9.65
$Ar-OH$	>10		H-bonded
$RCOO\cdots H\cdots OCOR^-$	20		H-bonded anion

### 3. Таблица инкрементов для оценки протонных химических сдвигов замещенных бензолов

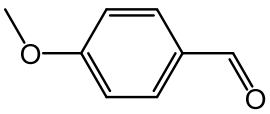
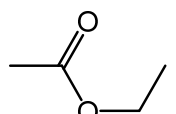
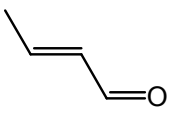
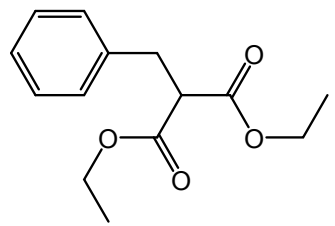
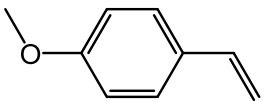
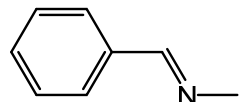
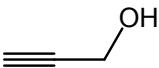
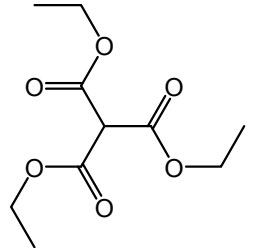
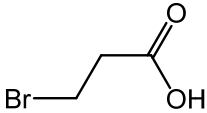
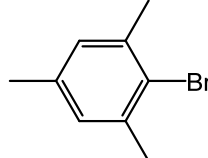
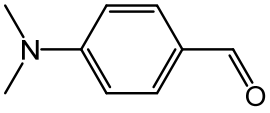
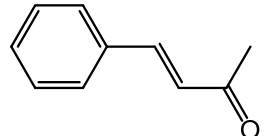
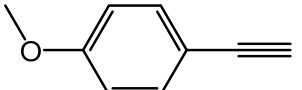
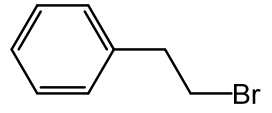
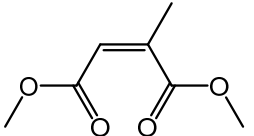
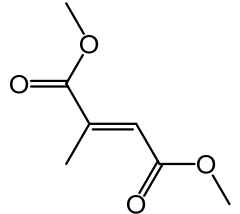
$$\delta = 7.26 + \sum I$$

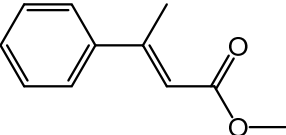
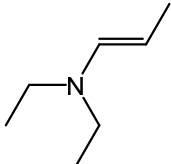
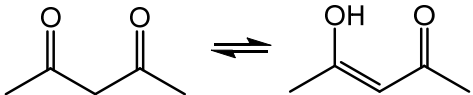
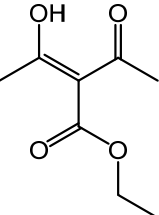
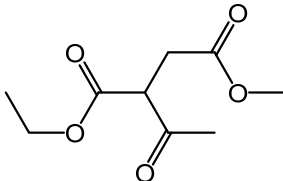
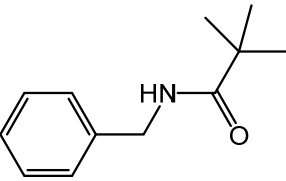
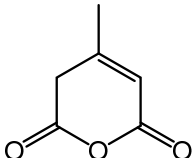
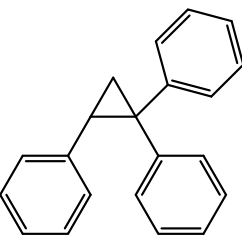
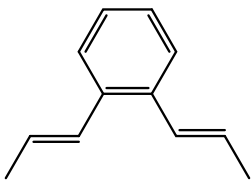
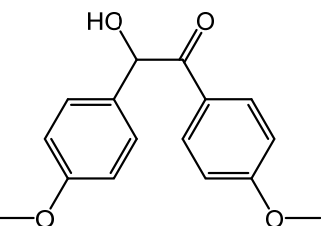
R	I <sub>орто</sub>	I <sub>мета</sub>	I <sub>пара</sub>
-H	0	0	0
-CH <sub>3</sub>	-0.18	-0.10	-0.20
-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	-0.15	-0.06	-0.18
-CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.13	-0.08	-0.18
-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	+0.02	-0.09	-0.22
-CH <sub>2</sub> Cl	+0.00	+0.01	+0.00
-CH <sub>2</sub> OH	-0.07	-0.07	-0.07
-CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	+0.01	+0.01	+0.01
-CH=CH <sub>2</sub>	+0.06	-0.03	-0.10
-C≡CH	+0.15	-0.02	-0.01
-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	+0.30	+0.12	+0.10
-CHO	+0.56	+0.22	+0.29
-CO-CH <sub>3</sub>	+0.62	+0.14	+0.21
-CO-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	+0.63	+0.13	+0.20
-CO-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	+0.47	+0.13	+0.22
-COOH	+0.85	+0.18	+0.25
-COO-CH <sub>3</sub>	+0.71	+0.11	+0.21
-CO-O-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	+0.90	+0.17	+0.27
-CO-NH <sub>2</sub>	+0.61	+0.10	+0.17
-CO-Cl	+0.84	+0.20	+0.36
-CN	+0.36	+0.18	+0.28
-NH <sub>2</sub>	-0.75	-0.25	-0.65
-NH-CH <sub>3</sub>	-0.80	-0.22	-0.68
-N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.66	-0.18	-0.67
-N <sup>+</sup> (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> I <sup>-</sup>	+0.69	+0.36	+0.31
-NH-CO-CH <sub>3</sub>	+0.12	-0.07	-0.28
-NO	+0.58	+0.31	+0.37
-NO <sub>2</sub>	+0.95	+0.26	+0.38
-SH	-0.08	-0.16	-0.22
-SCH <sub>3</sub>	-0.08	-0.10	-0.24
-S-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	+0.06	-0.09	-0.15
-SO <sub>2</sub> -OH	+0.64	+0.26	+0.36
-SO <sub>2</sub> -NH <sub>2</sub>	+0.66	+0.26	+0.36
-OH	-0.56	-0.12	-0.45
-OCH <sub>3</sub>	-0.48	-0.09	-0.44
-OCH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>	-0.46	-0.10	-0.43
-OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-0.29	-0.05	-0.23
-O-CO-CH <sub>3</sub>	-0.25	+0.03	-0.13
-O-CO-C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-0.09	+0.09	-0.08
-F	-0.26	+0.00	-0.20
-Cl	+0.03	-0.02	-0.09
-Br	+0.18	-0.08	-0.04
-I	+0.39	-0.21	-0.03

#### 4. Типичные величины констант спин-спиновой взаимодействия в Гц

$\text{H}-\text{C}-\text{H } sp^3$	$-10 \div -20$		$6 \div 14$	$\text{H}-^{13}\text{CH}_3$	125
	$0 \div +4$		$10 \div 18$		157
$\text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H } sp^3$	$2 \div 8$		$4 \div 10$	$\text{H}-^{13}\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	250
	$10 \div 13$		$0.5 \div 2$	$^{13}\text{CH}_3\text{Cl}$	151
	$2 \div 5$	$>\text{C}=\text{CH}-$ $\text{CH}=\text{C}<$	$10 \div 13$	$^{13}\text{CH}_2\text{Cl}_2$	178
	$2 \div 5$		$5 \div 9$	$^{13}\text{CHCl}_3$	209
	$3 \div 9$		$1 \div 3$		157.5
	$5 \div 12$		$0.3 \div 0.6$		1.0
	$4 \div 10$				7.4
					-1.1

# Ответы к упражнениям

1.		3.	
5.		7.	
9.		11.	
13.		15.	
17.		19.	
21.		23.	
25.		27.	
29.		31.	

33.		35.	
37.	$\text{H}_3\text{C}-\text{NH}_3^+ \text{Cl}^-$	39.	
41.		43.	
45.		47.	
49.		51.	
53.		55.	